



Une approche bayésienne de l'inversion. Application à l'imagerie de diffraction dans les domaines micro-onde et optique

H Ayasso

► To cite this version:

H Ayasso. Une approche bayésienne de l'inversion. Application à l'imagerie de diffraction dans les domaines micro-onde et optique. Traitement du signal et de l'image [eess.SP]. Université Paris Sud - Paris XI, 2010. Français. NNT : . tel-00564015

HAL Id: tel-00564015

<https://theses.hal.science/tel-00564015>

Submitted on 7 Feb 2011

HAL is a multi-disciplinary open access archive for the deposit and dissemination of scientific research documents, whether they are published or not. The documents may come from teaching and research institutions in France or abroad, or from public or private research centers.

L'archive ouverte pluridisciplinaire **HAL**, est destinée au dépôt et à la diffusion de documents scientifiques de niveau recherche, publiés ou non, émanant des établissements d'enseignement et de recherche français ou étrangers, des laboratoires publics ou privés.

THÈSE DE DOCTORAT

Spécialité: Physique

Ecole Doctorale “Sciences et Technologies de l’Information, des
Télécommunications et des Systèmes”

Présentée par
Hacheme AYASSO

Une approche bayésienne de l’inversion. Application à l’imagerie de diffraction dans les domaines micro-onde et optique

Soutenue le 10/12/2010 devant la Commission d’examen:

M.	Bernard DUCHÊNE	(Directeur de thèse)
M.	Jean François GIOVANNELLI	(Rapporteur)
M.	François GOUDAIL	(Président du jury)
M.	Ali MOHAMMAD-DJAFARI	(Directeur de thèse)
M.	Anthony QUINN	(Examineur)
Mme.	Anne SENTENAC	(Rapporteur)



Thèse préparée au
Laboratoire des Signaux et Systèmes
UMR8506 (Univ Paris-Sud – CNRS – SUPELEC)
SUPELEC, 3 rue Joliot-Curie,
91192 Gif-sur-Yvette, France

Résumé

Dans ce travail, nous nous intéressons à l'imagerie de diffraction dans des configurations à deux ou trois dimensions avec pour objectif la reconstruction d'une image (fonction contraste) d'un objet inconnu à l'aide de plusieurs mesures du champ qu'il diffracte. Ce champ résulte de l'interaction entre l'objet et un champ incident connu dont la direction de propagation et la fréquence peuvent varier. La difficulté de ce problème réside dans la non-linéarité du modèle direct et le caractère mal posé du problème inverse qui nécessite l'introduction d'une information *a priori* (régularisation). Pour cela, nous utilisons une approche bayésienne avec une estimation conjointe du contraste de l'objet, des courants induits et des autres paramètres du modèle. Le modèle direct est décrit par deux équations intégrales couplées exprimant les champs électriques observé et existant à l'intérieur de l'objet, dont les versions discrètes sont obtenues à l'aide de la méthode des moments. Pour l'inversion, l'approche bayésienne permet de modéliser notre connaissance *a priori* sur l'objet sous forme probabiliste. Les objets que nous étudions ici sont connus pour être constitués d'un nombre fini de matériaux homogènes répartis en régions compactes. Cette information *a priori* est introduite dans l'algorithme d'inversion à l'aide d'un mélange de gaussiennes, où chaque gaussienne représente une classe de matériaux, tandis que la compacité des régions est prise en compte au travers d'un modèle de Markov caché. La nature non linéaire du modèle direct et l'utilisation de cet *a priori* nous amènent à des estimateurs qui n'ont pas de formes explicites. Une approximation est donc nécessaire et deux voies sont possibles pour cela : une approche numérique, par exemple MCMC, et une approche analytique comme l'approche bayésienne variationnelle. Nous avons testé ces deux approches qui ont donné de bons résultats de reconstruction par rapport aux méthodes classiques. Cependant, l'approche bayésienne variationnelle permet de gagner énormément en temps de calcul par rapport à la méthode MCMC.

Mots-clefs : Imagerie micro-onde, tomographie optique par diffraction, inférence bayésienne, Gauss-Markov-Potts, MCMC, approche bayésienne variationnelle.

A BAYESIAN APPROACH FOR INVERSE PROBLEMS. APPLICATION TO SCATTERING IMAGING IN THE MICROWAVE AND OPTICAL DOMAINS

Abstract

In this work, we are interested in scattering imaging in 2D and 3D configurations, where our objective is to reconstruct an image (contrast function) of an unknown object using measurements of the scattered field that results from the interaction between the unknown object and a known incident field whose propagation direction and frequency can be varied. The difficulty of this problem lies in the non-linearity of the forward model and in the ill-posed nature of the inverse problem which requires the introduction of prior information (regularization). For this purpose, we use a Bayesian approach with a joint estimation of the object contrast, currents induced inside the objects and other model parameters. The forward continuous model is described by two coupled integral equations. The discrete counterparts of the latter are obtained by means of the method of moments (MoM). For the inversion, the Bayesian approach allows us to model our knowledge about the object in a probabilistic way. For the given applications, the object under test is known to be composed of a finite number of materials, which implies that the desired image consists of a finite number of compact homogeneous regions. This justifies the choice of a prior model based upon a mixture of Gaussian with a hidden Markovian variable that represents the label of the regions. The nonlinear nature of the forward model and the use of this prior leads to joint posterior estimators which are intractable. Therefore, an approximation of the posterior distribution is needed. Two approaches are possible : a numerical approach, for example MCMC, and an analytical approach as the variational Bayesian approach. We have tested both approaches and both of them yield very good reconstruction results compared to classical methods. However, the variational Bayesian approach allows a much faster reconstruction as compared to the MCMC stochastic sampling method.

Keywords : Microwave imaging, optical diffraction tomography, Bayesian inference, Gauss-Markov-Potts, MCMC, variational bayesian approach.

Remerciements

Résumer un travail de thèse de trois ans dans un manuscrit de deux cents pages est une tâche difficile. Cependant, résumer les moments qu'on a partagés pendant cette période dans une page est une mission impossible. J'essaie, avec ces mots, de remercier les personnes qui m'ont accompagné durant cette belle aventure.

Je commence tout d'abord par remercier mes directeurs de thèse Monsieur Ali Mohammad-Djafari et Monsieur Bernard Duchêne pour la confiance que vous m'avez accordée. M. Mohammad-Djafari, votre enthousiasme et vos précieux conseils m'ont fourni une grande motivation dans mon travail. M. Duchêne, votre rigueur scientifique et votre patience m'ont aidé énormément à améliorer mon travail.

Je tiens aussi à remercier les membres du jury qui sont venus de très loin participer à ma soutenance malgré les conditions climatiques très difficiles sur le grand "patinoire" qu'était devenu le plateau de Saclay. Je remercie sincèrement les deux rapporteurs, Madame Anne Sentenac et Monsieur Jean-François Giovannelli, d'avoir accepté de rapporter ce travail. Je vous suis reconnaissant du temps que vous avez consacré à lire en détail mon travail et vos précieux conseils qui m'ont permis d'améliorer ce document.

J'adresse toute ma gratitude à Monsieur Anthony Quinn d'avoir accepté d'examiner mon travail malgré son emploi du temps très chargé. Sa rigueur mathématique et ses remarques pertinentes m'encouragent à être plus rigoureux dans mes travaux futurs. Mes remerciements les plus respectueux vont à Monsieur François Goudail pour avoir accepté de présider le jury.

Un grand merci au Groupe Problèmes Inverses (GPI) qui m'a accueilli pendant ma thèse. Je n'oublierai jamais les moments conviviaux autour d'un café noir, les discussions, les anecdotes et les séminaires internes. Merci à Thomas Rodet, le chef de l'équipe, pour tout ce qu'il a fait pour nous aider à travailler dans les meilleures conditions. En plus de son rôle de chef, il a été un grand-frère pour les membres de l'équipe.

Je remercie aussi Nicolas Gac pour les nombreuses discussions, spécialement en calcul parallèle avec les processeurs graphiques (GPU). J'exprime aussi ma gratitude à Aurélia Fraysse pour m'avoir encouragé pendant les périodes difficiles. J'espère qu'elle quittera le laboratoire moins tard assez souvent. Merci aussi à Matthieu Kowalski et Christophe Vignat, sans oublier le grand doyen du GPI M. Guy Demoment.

Je tiens à témoigner toute ma reconnaissance à Sofia Fekih-Salem pour le travail que nous avons réalisé en commun et pour ses connaissances en tomographie X. Je remercie également Dorian Pougaza d'avoir partagé ces théorèmes sur les copules. Aux amis et collègues avec qui j'ai partagé de très bons moments, je vous dis un très grand merci. Votre présence a donné une ambiance chaleureuse au laboratoire. Je remercie particulièrement : Asier, Amadou, Boujemah, Cagatay, DinhThang, Francesca, François, Lana, Sha, Sofiane et Veronica. Mes meilleurs souhaits à nos représentants Nabil Elkorso et Ziad Naja pour une continuation plus efficace et bon courage aux jeunes doctorants : Caifang, Elsa, François, Ghazaleh, Ning et Thomas.

Je tiens à remercier M. Eric Walter et M. Silviu-Iulian Niculescu de m'avoir accueilli au sein du laboratoire des Signaux et Systèmes, ainsi que les différents membres du

laboratoire. En particulier, je suis reconnaissant à Frederic Desprez notre grand chef informatique pour son aide et Daniel Rouet pour nos nombreuses discussions.

J'ai eu l'honneur de travailler avec José Picheral pendant mon monitorat à Supélec. Sa pédagogie et sa gentillesse m'ont grandement inspiré dans mes enseignements.

Je dédie une mention très spéciale à Diarra Fall. Je sais que ces quelques mots ne suffisent pas pour te remercier pour tout l'effort que tu as fourni afin de corriger les fautes de français de ce manuscrit. Ta sensibilité aux erreurs, ta minutie ainsi que ta patience m'ont été d'une grande aide. Je te souhaite le meilleur pour la suite.

Enfin, je ne trouve pas de mots pour exprimer ma gratitude et ma reconnaissance à mes parents, mon frère et ma soeur. Merci de m'avoir soutenu durant ces années, d'avoir été là spécialement pendant les moments difficiles pour m'aider à réaliser ce rêve. Merci aussi aux amis qui m'ont accompagné durant ce voyage.

Paris, à l'aube d'une nouvelle année et d'un nouvel espoir...
Hacheme AYASSO



Table des matières

Page de garde	1
Résumé	3
Tables des matières	13
Notations	15
1 Introduction générale	17
1.1 Contexte d'étude	17
1.2 Principe de l'imagerie	18
1.2.1 Le cas sans diffraction	20
1.2.2 Le cas avec diffraction	21
1.3 Approches analytiques de l'inversion	27
1.3.1 Tomographie classique	27
1.3.2 Tomographie par diffraction	29
1.4 Approches numériques de l'inversion	31
1.4.1 Méthodes déterministes	32
1.4.2 Méthodes probabilistes	40
1.4.3 Approche bayésienne	42
1.5 Contribution et plan de l'étude	47
2 Modélisation directe	49
2.1 Introduction	49
2.2 Tomographie classique	50
2.3 Imagerie de diffraction	53
2.3.1 Fonctions de Green	54

2.3.2	Cas 2D-TM	56
2.3.3	Cas 2D-TE	58
2.3.4	Cas 3D	60
2.4	Validation des modèles	63
2.4.1	Tomographie X	64
2.4.2	Tomographie optique	65
2.4.3	Imagerie micro-onde	66
2.5	Discussion	67
3	Modèles <i>a priori</i>	73
3.1	Introduction	73
3.2	Vraisemblances	74
3.2.1	Cas linéaire	74
3.2.2	Cas non linéaire	74
3.3	Modèle de Gauss-Markov-Potts	75
3.3.1	Contraste	75
3.3.2	Champ caché	78
3.3.3	Hyper-paramètres	81
3.4	Estimation Jointe	84
3.5	Discussion	85
4	L'échantillonnage stochastique	87
4.1	Introduction	87
4.1.1	L'échantillonnage d'importance	88
4.1.2	L'échantillonnage de rejet	88
4.1.3	L'échantillonnage de Metroplis-Hasting	89
4.1.4	L'échantillonnage de Gibbs	90
4.1.5	L'échantillonnage imbriqué	91
4.2	Choix de la méthode d'échantillonnage	92
4.3	Gibbs pour le modèle linéaire (gbLMGI-gbLMGM)	93
4.3.1	Contraste	93
4.3.2	Champ caché	94
4.3.3	Hyper-paramètres	94

4.4	Gibbs pour le modèle non linéaire (gbCSMGI-gbCSMGM)	95
4.4.1	Courants	96
4.4.2	Contraste	96
4.4.3	Champ caché	96
4.4.4	Hyper-paramètres	97
4.5	Mise en œuvre des échantillonneurs	98
4.5.1	Échantillonnage d'une loi gaussienne multivariée	99
4.5.2	Échantillonnage d'une loi de Potts	99
4.6	Discussion	100
5	L'approche bayésienne variationnelle	101
5.1	Introduction	101
5.1.1	Principe de l'approche variationnelle	101
5.1.2	Lien avec la physique statistique	103
5.2	Choix de séparation	104
5.3	Le cas linéaire (vbLMGI-vbLMGM)	105
5.3.1	Contraste	105
5.3.2	Champ caché	107
5.3.3	Hyper-paramètres	107
5.4	Le cas non linéaire (vbCSMGI-vbCSMGM)	108
5.4.1	Courants induits	109
5.4.2	Contraste	110
5.4.3	Champ caché	112
5.4.4	Hyper-paramètres	112
5.5	L'énergie libre	114
5.6	Mise en œuvre	116
5.7	Discussion	116
6	Applications et résultats	117
6.1	Introduction	117
6.2	Configurations de mesure	117
6.2.1	Tomographie X	117
6.2.2	Tomographie optique de diffraction	118

6.2.3	Imagerie micro-onde 3D	120
6.3	Résultats	120
6.3.1	Tomographie X	120
6.3.2	Tomographie optique de diffraction	123
6.3.3	Imagerie micro-onde	128
6.4	Discussions	129
6.4.1	Qualité de reconstruction	131
6.4.2	Temps de calcul	134
6.4.3	Nombre de classes	135
6.5	Résumé	137
7	Conclusions et perspectives	139
7.1	Bilan	139
7.2	Perspectives	140
7.2.1	Calcul bayésien	140
7.2.2	Modèle <i>a priori</i>	141
7.2.3	Mises en œuvre	141
7.2.4	Choix de traitement de la non linéarité	141
7.2.5	Modèle direct	142
A	Définitions des lois de probabilité	143
A.1	Gaussien	143
A.2	Gamma et inverse gamma	144
B	Estimation du paramètre de Potts	145
B.1	Introduction	145
B.2	Approximation séparable	146
B.3	Résultat	147
C	Détails de calcul de vbLMGI et vbLMGM	149
C.1	Contraste	149
C.2	Champ caché	151
C.3	Hyper-paramètres	152
C.3.1	Variance du bruit	152

C.3.2	Variances des classes	153
C.3.3	Moyennes	154
C.4	Calcul des opérateurs	154
C.5	Analogie avec une méthode de gradient	154
D	Détails de calcul de vbCSMGI et vbCSMGM	157
D.1	Courants induits	157
D.2	Contraste	159
D.3	Champ caché	160
D.4	Hyper-paramètres	161
D.4.1	Variance du bruit	161
D.4.2	Variances des classes	162
D.4.3	Moyenne	163
D.5	Calcul des opérateurs de couplage	163
D.5.1	Imagerie 2D en polarisation TM	164
D.5.2	Imagerie 3D	164
D.5.3	Imagerie 2D en milieu stratifié	165
	Diffusion des résultats	167
	Papier I : Bayesian inversion for optical diffraction tomography	171
	Papier II : Optical diffraction tomography within a variational Bayesian framework	185
	Papier III : Joint NDT Image Restoration and Segmentation Using Gauss–Markov–Potts Prior Models and Variational Bayesian Computation	203
	Références	217

Notations

On définit ici les différentes notations utilisées dans ce manuscrit. Pour faciliter l'écriture des équations, on représente les mêmes grandeurs sous forme de matrices diagonales ou vectorielles, notamment pour le contraste \mathbf{x} , les moyennes \mathbf{m} et les variances \mathbf{v} . Comme règle générale, on note le vecteur du contraste \mathbf{x} , $x(\mathbf{r})$ est un élément (pixel/voxel) et \mathbf{X} la matrice diagonale associée $\mathbf{X} = \mathbf{Diag}(\mathbf{x})$.

- \mathbf{y} : les données dépendant de la position \mathbf{r} , de l'incidence *inc* et de la fréquence. Pour des raisons de lisibilité des équations, on les regroupe tous dans \mathbf{y} . La même chose s'applique pour \mathbf{w} et \mathbf{E} .
- \mathbf{x} : l'image de l'objet inconnu,
- \mathbf{w} : les courants induits,
- \mathbf{E}^o : le champ total en l'absence d'objet,
- \mathbf{E} : le champ total en présence de l'objet,
- ϵ, ξ : les erreurs de modélisation,
- \mathbf{H} : la matrice de projection dans le cas de la tomographie classique,
- \mathbf{G}^c : la matrice de couplage dans le cas de l'imagerie de diffraction,
- \mathbf{G}^o : la matrice d'observation dans le cas de l'imagerie de diffraction.

Les différentes constantes définissant la taille du problème.

- M : le nombre de points de mesure,
- N : le nombre de pixels/voxels discrétisant le domaine test,
- N_P : le nombre de polarisations $N_P = 1, 2$ ou 3 ,
- N_f : le nombre de fréquences d'excitation,
- N_v : le nombre de projections (nombre d'angles de vue),
- K : le nombre de matériaux constituant l'objet.

Les opérateurs directs et adjoints,

- $\mathcal{D}_X(\cdot)$: l'opérateur direct pour la tomographie classique (i.e. $\mathcal{D}_X(\mathbf{x}) = \mathbf{H}\mathbf{x}$),
- $\mathcal{T}_X(\cdot)$: l'opérateur adjoint pour la tomographie classique (i.e. $\mathcal{T}_X(\mathbf{x}) = \mathbf{H}^t\mathbf{x}$),
- $\mathcal{D}_C(\cdot)$: l'opérateur direct de couplage, $\mathcal{D}_C(\mathbf{w}) = \mathbf{G}^c\mathbf{w}$,
- $\mathcal{T}_C(\cdot)$: l'opérateur adjoint de couplage, $\mathcal{T}_C(\mathbf{w}) = \mathbf{G}^{cH}\mathbf{w}$,
- $\mathcal{D}_O(\cdot)$: l'opérateur direct d'observation, $\mathcal{D}_O(\mathbf{w}) = \mathbf{G}^o\mathbf{w}$,
- $\mathcal{T}_O(\cdot)$: l'opérateur adjoint d'observation, $\mathcal{T}_O(\mathbf{w}) = \mathbf{G}^{oH}\mathbf{w}$.

Les lois *a priori* :

- $\mathbf{z} = \{z(\mathbf{r}), \mathbf{r} \in \mathcal{R}\}$: le champ caché ou la segmentation de l'objet,
- Υ : le paramètre de corrélation dans le champ de Potts,
- $\boldsymbol{\eta} = \{\eta_1, \dots, \eta_\kappa, \dots, \eta_K\}$: l'ensemble des moyennes *a priori* des classes,
- $\boldsymbol{\rho} = \{\rho_1, \dots, \rho_\kappa, \dots, \rho_K\}$: l'ensemble des variances *a priori* des classes,
- $p(z = \kappa) = \zeta_\kappa$: la probabilité qu'un pixel appartienne à la classe κ
- \mathbf{x} suit une loi gaussienne multivariée si $p(\mathbf{x}) = \mathcal{N}(\mathbf{m}_x, \mathbf{V}_x)$ où \mathbf{m}_x est le vecteur

des moyennes et \mathbf{V}_x la matrice de covariance,

- η_κ suit une loi gaussienne si $p(\eta_\kappa) = \mathcal{N}(\eta_0, \tau_0)$, où η_0 est la moyenne et τ_0 est la variance,
- ρ_κ suit une loi inverse-gamma si $p(\rho_\kappa) = \mathcal{IG}(\gamma_0, \phi_0)$,
- $\boldsymbol{\psi}$: l'ensemble des hyper-paramètres introduits par le modèle *a priori*.

Notations diverses :

- $\langle x \rangle_p$: le moment d'ordre 1 pour la variable x selon la distribution $p(x)$,
 $\langle x \rangle_p = \int xp(x)dx$,
- $\bar{x} = \exp(x)_q$: le moment d'ordre 1 pour la variable x ,
- $\hat{e}a$: la variable de forme de la loi *a posteriori* conditionnelle pour l'échantillonnage de Gibbs,
- $\tilde{\eta}$: la variable de forme de la loi *a posteriori* approchante dans l'approche variationnelle,
- $x(\mathbf{r})$: l'élément d'indice \mathbf{r} du vecteur \mathbf{x} ,
- $\mathbf{x}_{/\mathbf{r}}$: tous les éléments du vecteur \mathbf{x} sauf l'élément $x(\mathbf{r})$, $x_{/\mathbf{r}}(\mathbf{r}) = 0$
- $\mathcal{R}_\kappa = \{\mathbf{r} : z(\mathbf{r}) = \kappa\}$: l'ensemble des indices d'une classe κ ,
- $Diag(\mathbf{V})$: les éléments diagonaux d'une matrice \mathbf{V} ,
- $\mathbf{Diag}(\mathbf{x})$: une matrice diagonale dont les éléments sont donnés par le vecteur \mathbf{x} ,
- $\prod_{\mathbf{r}}$ ou $\sum_{\mathbf{r}}$: le produit ou la somme sur tous les éléments de l'espace,
- $\mathbf{w} = \mathbf{E} \circ \mathbf{x}$: le produit d'Hadamard entre les deux vecteurs \mathbf{w} et \mathbf{x} .
 $w(\mathbf{r}) = E(\mathbf{r})x(\mathbf{r})$,
- $\mathbf{x} \circ \mathbf{G}^c = \mathbf{Diag}(\mathbf{x}) \mathbf{G}^c$: le produit d'Hadamard entre le vecteur \mathbf{x} et la matrice \mathbf{G}^c ,
- \mathbf{x}^2 : la puissance 2 du vecteur \mathbf{x} élément par élément ($\mathbf{x}^2 = \mathbf{x}^* \circ \mathbf{x}$). De la même manière, on définit $\mathbf{G}^2 = \mathbf{G}^* \circ \mathbf{G}$, la puissance 2 d'une matrice,
- $\boldsymbol{\delta}_{\mathbf{r}}$: le vecteur Kronecker à l'indice \mathbf{r} ($\delta(\mathbf{r}) = 1$ et $\delta(/ \mathbf{r}) = \mathbf{0}$).

Introduction générale

1.1 Contexte d'étude

Dans notre vie quotidienne, l'interaction entre les ondes en général et le monde physique fournit une grande quantité d'informations sur les objets qui nous entourent. Des exemples illustrant ces propos sont : la réflexion de la lumière qui nous permet de voir notre entourage, la propagation du son dans l'espace qui nous permet de localiser une source sonore, la radiographie X et l'échographie ultrasonore qui nous permettent d'inspecter l'intérieur du corps humain. L'étude de la physique de cette interaction a suscité beaucoup d'intérêt et ceci afin de mieux comprendre les informations contenues dans ces ondes. Un mode particulier de cette interaction, appelé mode de diffraction, a lieu quand la longueur d'onde devient proche des dimensions de l'objet ou de ses inhomogénéités. Ceci donne lieu à une résonance de l'onde dans l'objet puis au rayonnement d'une onde diffractée.

Dans un problème d'imagerie de diffraction par ondes électromagnétiques, on cherche à reconstruire une image d'un objet inconnu éclairé par une onde connue à partir des mesures de champ diffracté autour de lui. Les mesures de ce champ sont réalisées pour plusieurs positions de source d'éclairage et/ou de fréquences d'excitation. L'image recherchée représente une cartographie des paramètres électromagnétiques de l'objet en question, plus précisément, sa permittivité diélectrique et sa conductivité (ε_r et σ), l'objet étant supposé ici non magnétique.

Du point de vue pratique, ce problème d'imagerie se pose pour de nombreuses applications. Par exemple en imagerie micro-onde, les tissus malins et sains ont des permittivités bien différentes [CMST84, JZLJ94], ce qui laisse présager l'obtention d'images présentant un bon contraste [LH01]. Cette imagerie est aussi utilisée dans l'exploration géophysique [Ric09], la détection d'objets enfouis [CLH06] et dans des applications de contrôle non destructif (CND) [CMPD04]. Récemment, sont apparues des applications de tomographie optique par diffraction destinées à imager des objets de dimensions

nanométriques, comme des cellules biologiques ou des objets artificiels issus des nanotechnologies [CKC⁺07, HSG07].

La recherche d'une solution pour de tels problèmes commence par l'utilisation de notre connaissance physique pour écrire un modèle mathématique reliant les données (le champ diffracté) y et la fonction contraste de l'objet inconnu x , sous la forme $y = \mathcal{S}(x)$ où $\mathcal{S}(\cdot)$ est le modèle direct (la fonction de transfert). La seconde étape est l'inversion où nous cherchons à estimer l'inconnue x à partir des données. En général, il n'y a pas de solution unique et stable. Ce problème est alors un problème inverse mal posé au sens de Hadamard et nécessite une régularisation. Cette régularisation a pour but d'obtenir une solution unique, stable et satisfaisant des contraintes qui correspondent à notre connaissance *a priori* sur l'objet. De plus, le modèle direct $\mathcal{S}(\cdot)$ est non linéaire ce qui rend la tâche de la recherche d'une solution plus compliquée. S'ajoutent à ces difficultés la grande dimension et la complexité des calculs liés au modèle direct.

Dans le reste de ce chapitre, nous détaillons ce problème en survolant l'état de l'art. Tout d'abord, une description de la physique du problème et du modèle direct associé est présentée. Ensuite, nous exposons les deux différentes approches possibles de ce problème : analytique et discrète, et nous mettons l'accent sur l'intérêt et les limitations de chacune d'elles. Puis, nous détaillons l'approche discrète, que nous avons choisie d'appliquer dans ce travail, du point de vue méthode de discrétisation et du point de vue méthode de régularisation. Les méthodes déterministes et probabilistes sont rappelées, avant de discuter de l'approche proposée. Enfin, nous définissons les contributions majeures de notre travail, le cadre de l'étude et son plan.

1.2 Principe de l'imagerie

On peut classer le problème d'imagerie en deux catégories (fig. 1.1) : l'imagerie passive où l'objet à imager émet lui même des rayonnements électromagnétiques que l'on observe et que l'on utilise pour reconstruire l'image (imagerie astronomique, thermographie infrarouge, ...) et l'imagerie active où on utilise une source éclairant l'objet et on observe le rayonnement résultant de l'interaction afin d'obtenir une image de l'objet. La classification suivante est aussi possible : l'imagerie qualitative et l'imagerie quantitative. En imagerie qualitative, on cherche à déterminer la forme et la position de l'objet inconnu. Par contre, en imagerie quantitative, les valeurs des paramètres physiques tels que la permittivité et la conductivité doivent elles aussi être obtenues.

Dans le cadre de ce travail, on se concentre sur l'imagerie quantitative active en régime harmonique où la source de rayonnement a une seule composante fréquentielle. La physique contrôlant l'interaction entre une onde électromagnétique et un objet inconnu est décrite par les équations de Maxwell :

$$\vec{\text{rot}} \vec{H}(\vec{r}) + i\omega\epsilon\vec{E}(\vec{r}) = \vec{w}_a(\vec{r}), \quad (1.1)$$

$$\vec{\text{rot}} \vec{E}(\vec{r}) - i\omega\mu\vec{H}(\vec{r}) = 0, \quad (1.2)$$

$$\vec{\nabla} \cdot \vec{B}(\vec{r}) = 0, \quad (1.3)$$

$$\vec{\nabla} \cdot \vec{D}(\vec{r}) = \rho(\vec{r}), \quad (1.4)$$

où \vec{B} est l'induction magnétique, \vec{D} est l'induction électrique (ou densité de flux élec-

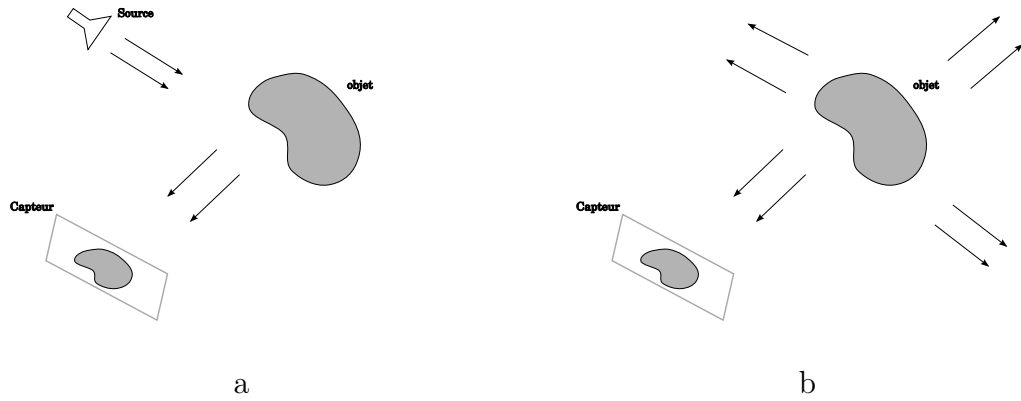


FIGURE 1.1 – a) L'imagerie active, b) L'imagerie passive

trique), \vec{E} est le champ électrique, \vec{H} le champ magnétique, ρ la densité de charges électriques, \vec{w}_a les courants appliqués, ε la permittivité diélectrique, μ la perméabilité magnétique et ω est la fréquence angulaire. L'étude de l'interaction avec un objet inconnu nécessite la résolution de ces équations.

Notons qu'ici nous nous intéressons à des milieux isotropes pour lesquels nous avons les relations constitutives suivantes :

$$\vec{D} = \varepsilon \vec{E}, \quad \vec{B} = \mu \vec{H}.$$

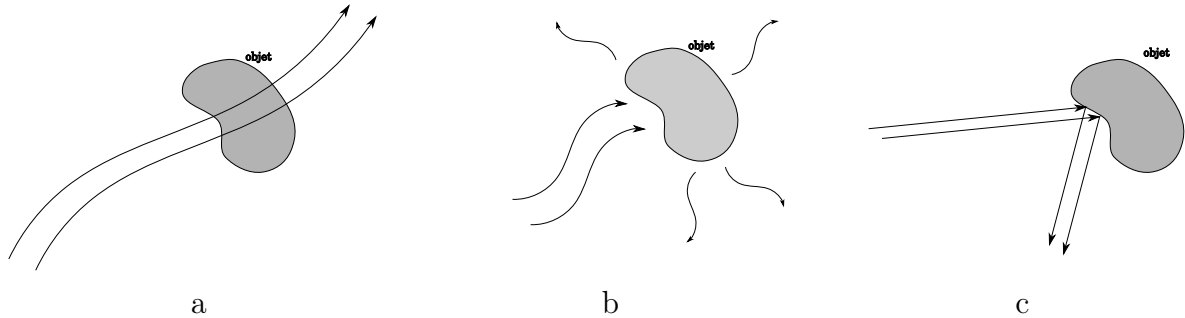


FIGURE 1.2 – a) La longueur d'onde très grande devant la dimension de l'objet ($\lambda \gg a$), b) la longueur d'onde proche de la dimension de l'objet ($\lambda \approx a$), c) la longueur d'onde très petite devant la dimension de l'objet ($\lambda \ll a$).

Pratiquement, on distingue trois modes d'interaction entre une onde électromagnétique et un objet inconnu en fonction du rapport entre la longueur d'onde λ et la dimension de l'objet a (fig. 1.2).

1. La longueur est très grande devant la dimension de l'objet ($\frac{\lambda}{a} \gg 1$) : l'effet de l'objet sur l'onde est quasi-inexistant et on peut considérer qu'il devient transparent.
2. La longueur d'onde est très petite devant la dimension de l'objet ($\frac{\lambda}{a} \ll 1$) : l'interaction entre l'objet et l'onde électromagnétique peut-être bien approchée par la

théorie de l'optique géométrique. Selon la nature de l'objet et ses paramètres électromagnétiques, un ou plusieurs phénomènes interviennent : réflexion, réfraction, absorption (atténuation) et diffusion dans les cas les plus complexes.

3. La longueur d'onde est du même ordre de grandeur que la dimension de l'objet ($\frac{\lambda}{a} \approx 1$) : l'interaction entre l'onde et l'objet entre dans un domaine de résonance et le phénomène de diffraction devient dominant. On a besoin des équations de Maxwell pour bien décrire le modèle correspondant à ce problème.

On s'intéresse dans ce travail aux deux derniers modes d'interaction. Plus précisément, nous détaillons les cas d'imagerie d'atténuation qui correspond à la tomographie X classique et l'imagerie de diffraction qui est notre principal objectif.

1.2.1 Le cas sans diffraction

Pour les petites longueurs d'onde λ , la propagation des ondes est modélisée grâce à l'optique géométrique [Sch04]. On suppose que l'onde se propage selon des lignes droites (rayons) et l'interaction avec des obstacles change sa direction et/ou son intensité. Selon la nature de l'obstacle, différents phénomènes sont constatés (fig. 1.3). Les principaux sont les suivants :

1. Réflexion/ réfraction : ces deux phénomènes se produisent quand le rayon rencontre une interface régulière entre deux milieux. Ce sont les bases de la modélisation dans les applications liées à l'imagerie optique classique.
2. Diffusion : ce phénomène est observé lorsque le rayon rencontre une interface irrégulière ou traverse un milieu quasi-transparent avec de nombreux petits diffuseurs ou petits obstacles sur lesquels le rayon change de direction plusieurs fois. Le modèle direct est souvent décrit par les équations de transport. Ce principe de propagation est utilisé dans l'imagerie de tissus mous [MSO⁺04] et l'imagerie fonctionnelle cérébrale [Arr99].
3. Absorption : dans ce cas le rayon perd en intensité lorsqu'il traverse un milieu dense. On suppose que le rayon garde sa direction et subit seulement une perte d'énergie. Ce phénomène est la base de la modélisation directe dans les applications de tomographie classique comme la tomographie X [BBM⁺00] et la tomographie à émission de positons [OF97].

On s'intéresse ici au dernier mode d'interaction appliqué à la tomographie classique transverse qui a fait l'objet de plusieurs travaux en imagerie médicale et en contrôle non destructif (CND). Le modèle physique est décrit par la loi de Beer-Lambert qui est discutée plus en détail dans le paragraphe 2.2. Du point de vue mathématique, nous écrivons les mesures y sous la forme de la transformée de Radon [Dea83] de l'objet recherché x . Prenons le cas 2D :

$$\begin{aligned} y(\theta, a_u) &= \mathcal{TR}[x](\theta, a_u) = \int_{L_{\theta, a_u}} x(l) dl \\ &= \iint x(a_x, a_y) \delta(a_u - a_x \cos(\theta) - a_y \sin(\theta)) da_x da_y, \end{aligned} \quad (1.5)$$

où θ est l'angle de projection, $a_u = a_x \cos(\theta) = a_y \sin(\theta)$ est la coordonnée sur l'axe de projection. Les données y , appelées aussi les projections, s'obtiennent en intégrant la

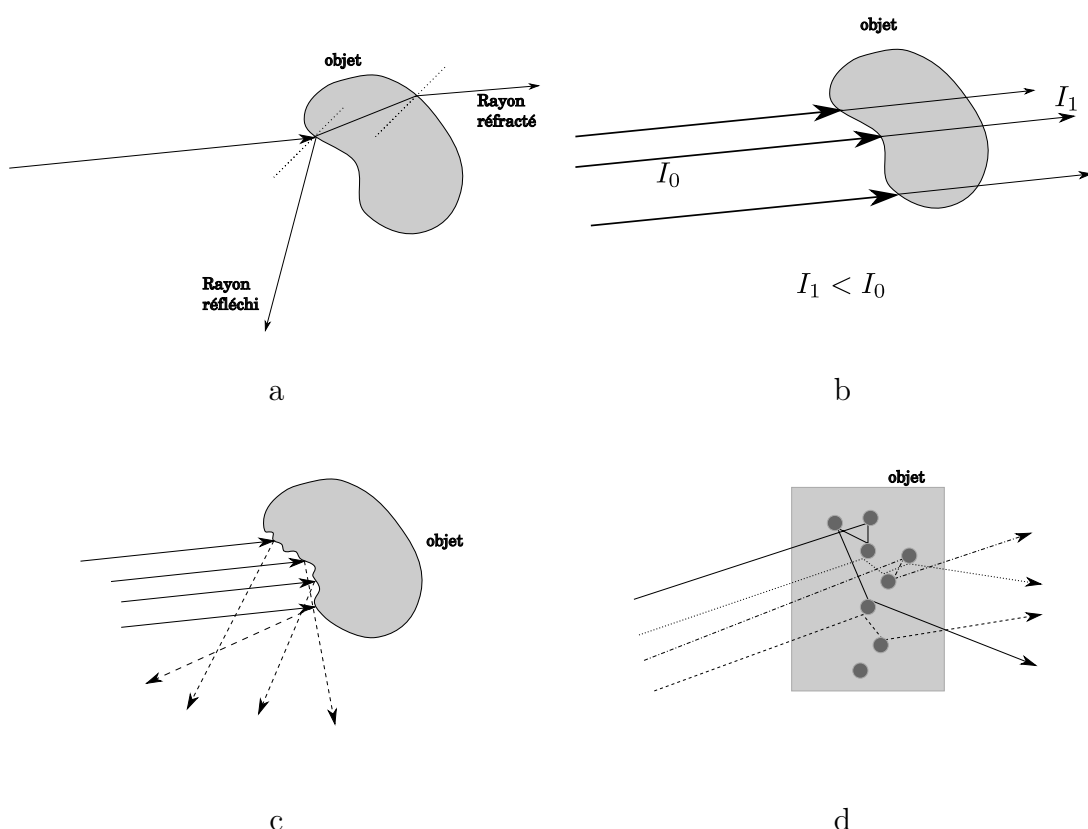


FIGURE 1.3 – a) Réflexion / réfraction, b) absorption , c) et d) diffusion

densité de l'objet x sur une ligne droite L_{θ, a_u} reliant la source et le point d'observation a_u (fig. 1.4). Il existe aussi la transformée en rayons divergents pour les sources divergentes [HSSW80].

Le théorème des coupes-projections [KS88], lie la transformée de Radon de l'objet x et sa transformée de Fourier :

$$\mathcal{F}_1(\mathcal{TR}[x](\theta, a_u)) = \mathcal{F}_2(x)(A_x, A_y), \quad \forall A_x, A_y \quad tq \quad A_x \cos(\theta) = A_y \sin(\theta). \quad (1.6)$$

Elle indique que la transformée de Fourier d'une projection à un angle θ est égale à une coupe de la transformée de Fourier de x prise dans la direction θ et passant par l'origine (fig. 1.5).

1.2.2 Le cas avec diffraction

Lorsque la dimension de l'obstacle devient proche de la longueur d'onde, l'interaction entre l'onde incidente et l'objet entre dans le domaine de résonance. Pour modéliser ce phénomène, plusieurs choix sont possibles :

- on repart des équations de Maxwell où on travaille directement sur les équations aux dérivées partielles. On distingue entre deux domaines de travail :
 1. le domaine fréquentiel : on utilise la méthode des élément finis (FEM) qui consiste à résoudre ce système d'équations en décomposant la solution sur une base de fonctions élémentaires [Jin02].

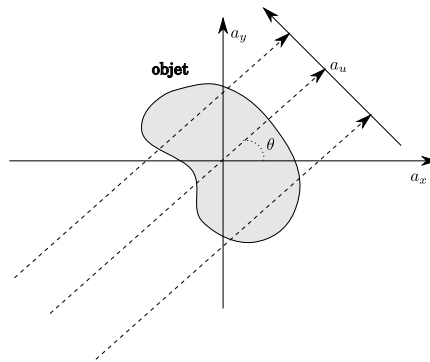


FIGURE 1.4 – La tomographie classique

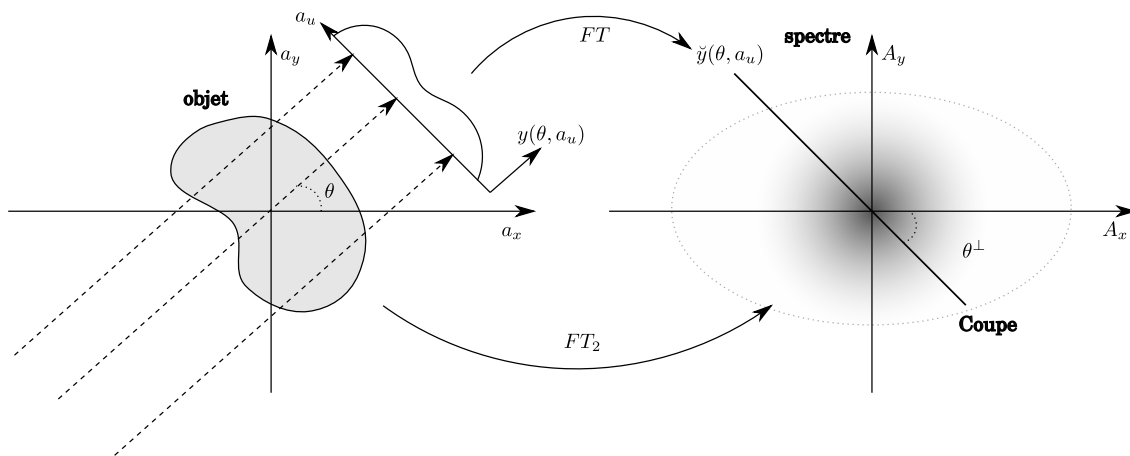


FIGURE 1.5 – Le théorème des coupes-projections

2. le domaine temporel : la méthode des différences finies dans le domaine temporel (FDTD) est utilisée afin d'obtenir la solution en approchant les termes dérivés par des différences temporelles finies [Yee66, TH05].

Cette approche est flexible pour analyser les milieux inhomogènes avec des structures complexes. Néanmoins, elle nécessite la discrétisation de l'espace sur un grand domaine et l'imposition de conditions aux limites *ad hoc* sur les bords de celui-ci. Ceci rend les algorithmes associés très gourmands au niveau du temps et calcul.

- Une représentation intégrale des champs obtenue à partir de l'équation des ondes de Helmholtz [Gib08, Har93].

Dans ce travail, nous optons pour une approche en représentation intégrale. On part de l'équation de Helmholtz. On applique le théorème de Green en tenant compte des conditions de rayonnement à l'infini et de continuité aux interfaces. En conséquence, on obtient une représentation intégrale des champs qui fait intervenir la fonction de Green de la géométrie considérée. Cette fonction caractérise le milieu étudié (espace libre, milieu stratifié, ...) et son expression dépend de la configuration de mesure 2D ou 3D. Nous détaillons la modélisation directe, les différentes configurations de mesure et l'expression de la fonction Green dans le paragraphe 2.3. En utilisant la représentation

intégrale, les données y (champ diffracté) s'écrivent sous la forme :

$$y(\theta', \vec{r}) = \int_{\mathcal{D}} G(\vec{r}, \vec{r}') x(\vec{r}') E(\vec{r}') d\vec{r}', \quad \vec{r} \in \mathcal{S}, \quad (1.7)$$

où \vec{r} est le point d'observation, θ est l'angle de la direction de propagation du champ incident E^{inc} , E est le champ total, \mathcal{D} est un domaine contenant l'objet à imager, \mathcal{S} est le domaine de mesure et x est la fonction contraste, soit $x(\vec{r}) = \omega^2 \mu_0 \varepsilon_0 \varepsilon_r(\vec{r}) + i\omega \mu_0 \sigma(\vec{r}) - k_0^2$ où ε_0 et μ_0 sont respectivement la permittivité diélectrique et la perméabilité magnétique du vide et ε et σ la permittivité relative et la conductivité de l'objet. Remarquons que le champ total E sur le domaine \mathcal{D} n'est pas connu et il faut une équation qui le décrit. Dans un contexte de faible diffraction, des travaux ont été menés comme ceux de Born [Bor33, BT88] et de Rytov [Tat61, HGS93], qui déterminent la valeur du champ total d'une manière approchée. Dans l'approximation de Born, on suppose que le champ total dans le domaine \mathcal{D} est égal au champ incident E^{inc} . L'approximation de Rytov, impose, pour sa part, une forme exponentielle complexe pour le champ total avec une phase égale au rapport entre le champ diffracté et le champ incident. Sous l'approximation de Born, l'équation 1.7 s'écrit sous la forme linéaire suivante :

$$y(\theta', \vec{r}) = \int_{\mathcal{D}} G(\vec{r}, \vec{r}') x(\vec{r}') E^{inc}(\vec{r}') d\vec{r}', \quad \vec{r} \in \mathcal{S}. \quad (1.8)$$

Supposons une onde incidente plane $E^{inc}(\vec{r}) = e^{i\vec{k}'\vec{r}}$, où $\vec{k}' = k_0 \vec{a}_{\theta'}$ est le vecteur de propagation, $k_0 = \frac{2\pi}{\lambda}$ la constante de propagation et θ' l'angle de la direction de propagation du champ incident. La dernière équation s'écrit dans le cas d'espace libre :

$$y(\theta', \vec{r}) = \int_{\mathcal{D}} G(\vec{r} - \vec{r}') e^{i\vec{k}'\vec{r}'} x(\vec{r}') d\vec{r}'. \quad (1.9)$$

Sous l'hypothèse que le domaine \mathcal{D} est compris dans un disque de rayon $r_{\mathcal{D}}$ et que les mesures se font sur un cercle de rayon $|\vec{r}| > r_{\mathcal{D}}$, on définit l'opérateur de propagation comme suit :

$$\mathcal{TU}[x](\theta', \vec{r}) = e^{-i\vec{k}'\vec{r}} \int G(\vec{r} - \vec{r}') e^{i\vec{k}'\vec{r}'} x(\vec{r}') d\vec{r}'. \quad (1.10)$$

Dans [Dev82], l'auteur présente l'extension du théorème des coupes-projections pour le cas de cet opérateur. La transformée de l'opérateur de propagation dans le domaine de Fourier forme un cercle (au lieu d'une droite dans le cas de la tomographie classique), passant par l'origine, de rayon k_0 et dont le centre a pour coordonnées (k_0, θ') (fig. 1.6). Ce cercle peut être divisé en deux demi-cercles dont l'un, passant par le centre, correspond à des mesures en transmission et l'autre correspond à des mesures en réflexion. Remarquons que si on dispose de projections et de mesures tout autour de l'objet ($\theta' \in [0, 2\pi], \theta \in [0, 2\pi]$), le support de l'information spectral sera un disque de rayon $2k_0$. Dans le cas de la tomographie de transmission, le support des données est réduit à un disque de rayon $\sqrt{2}k_0$ couvrant les basses fréquences. Par contre dans le cas de la tomographie en réflexion, le support des données devient un anneau de rayon intérieur $\sqrt{2}k_0$ et de rayon extérieur $2k_0$ couvrant les hautes fréquences (fig. 1.7). Le support est d'autant plus réduit que les angles de projection et les angles de mesure sont situés dans un secteur restreint. Ceci donne une idée sur la difficulté posée par la configuration de mesure.



b



b

[NW01] :

$$(1.11)$$

le domaine \mathcal{D} désignée sous le nom d'équation de couplage; elle représente avec l'équa-

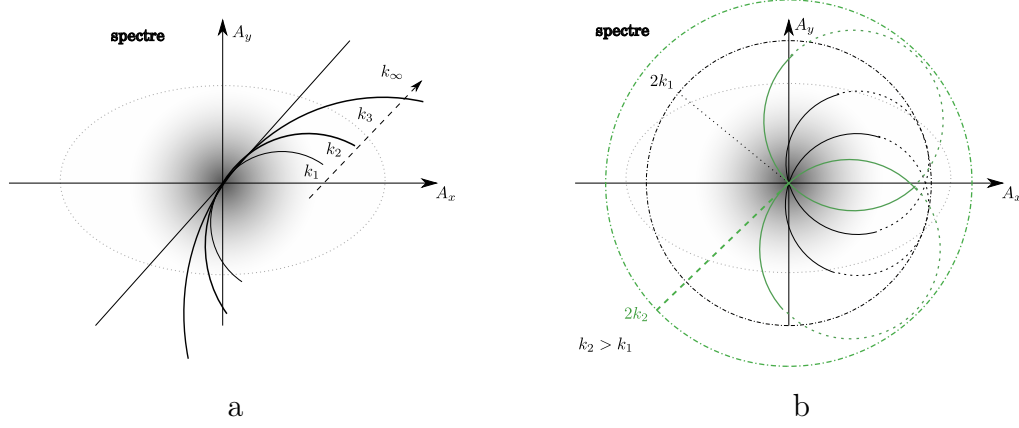


FIGURE 1.8 – a) L'équivalence avec le théorème des coupes-projections quand k devient très grand, b) les données avec des fréquences plus grandes se retrouvent sur des cercles de rayon plus grand

tion d'observation (1.7) le modèle direct du problème d'imagerie de diffraction :

$$y(\vec{r}) = \int_{\mathcal{D}} G(\vec{r}, \vec{r}') x(\vec{r}') E(\vec{r}') d\vec{r}', \quad \vec{r} \in \mathcal{S} \quad (\text{observation}) \quad (1.12)$$

$$E(\vec{r}) = E^o(\vec{r}) + \int G(\vec{r}, \vec{r}') x(\vec{r}') E(\vec{r}') d\vec{r}', \quad \vec{r} \in \mathcal{D}. \quad (\text{couplage}) \quad (1.13)$$

Nous nous retrouvons avec un modèle non linéaire, évidemment plus compliqué que le modèle linéarisé dans le cadre des approximations de Born et Rytov. Ce modèle est discuté plus en détail dans le paragraphe 2.3. Ce modèle direct, constitué de deux équations intégrales en champ électrique couplées, est discrétisé à l'aide de la méthode des moments qui permet de transformer ces équations intégrales en un système linéaire de la forme :

$$\mathcal{L}w = E^{inc}, \quad (1.14)$$

où \mathcal{L} est un opérateur linéaire et où l'on cherche w sachant E^{inc} . Le principe consiste à décomposer la fonction w sur un ensemble de fonctions de base c_n :

$$w = \sum_{n=1}^N w_n c_n. \quad (1.15)$$

En utilisant la linéarité de l'opérateur, on obtient :

$$\sum_{n=1}^N w_n \mathcal{L}c_n = E^{inc}. \quad (1.16)$$

Pour discrétiser l'équation précédente, d'autres fonctions t_m , $m = 1, 2, \dots, M$, dites fonctions tests, sont choisies en faisant le produit scalaire entre chacune d'elles et l'équation en question :

$$\sum_{n=1}^N w_n \langle t_m, \mathcal{L}c_n \rangle = \langle t_m, E^{inc} \rangle, \quad \forall m. \quad (1.17)$$

En regroupant les équations précédentes sous forme vectorielle, on trouve le modèle discret :

$$\mathbf{L}\mathbf{w} = \mathbf{E}^{inc}, \quad (1.18)$$

avec

$$\mathbf{w} = \begin{pmatrix} w_1 \\ w_2 \\ \vdots \\ w_N \end{pmatrix}, \mathbf{E}^{inc} = \begin{pmatrix} \langle t_1, E^{inc} \rangle \\ \langle t_2, E^{inc} \rangle \\ \vdots \\ \langle t_M, E^{inc} \rangle \end{pmatrix}, \mathbf{L} = \begin{pmatrix} \langle t_1, \mathcal{L}c_1 \rangle & \dots & \langle t_1, \mathcal{L}c_N \rangle \\ \vdots & \ddots & \vdots \\ \langle t_m, \mathcal{L}c_1 \rangle & \langle t_m, \mathcal{L}c_n \rangle & \langle t_m, \mathcal{L}c_N \rangle \\ \vdots & \ddots & \vdots \\ \langle t_M, \mathcal{L}c_1 \rangle & \dots & \langle t_M, \mathcal{L}c_N \rangle \end{pmatrix}. \quad (1.19)$$

Du point de vue pratique, le calcul des éléments de la matrice \mathbf{L} nécessite le calcul des intégrales de la fonction de Green sur des volumes ou surfaces élémentaires, comme détaillé dans 1.2.2, ce qui limite l'application de cette méthode pour des structures complexes. La méthode des moments peut être résumée en trois étapes :

1. écriture de la représentation intégrale avec la fonction de Green correspondant au milieu étudié,
2. choix de la fonction de base c_n . Plusieurs fonctions ont été étudiées dans la littérature : rectangulaire, triangulaire... Le choix de cette fonction joue un rôle important dans la qualité d'approximation du modèle [PRM97](fig. 1.9),
3. choix des fonctions tests t_m . Souvent la distribution de Dirac est utilisée.

La solution du problème direct nécessite la résolution du système d'équations précédent avec un algorithme adapté dont le choix est détaillé dans 2.4. Cette méthode est bien adaptée pour la résolution de problèmes de diffraction et de rayonnement dans le domaine de résonance.

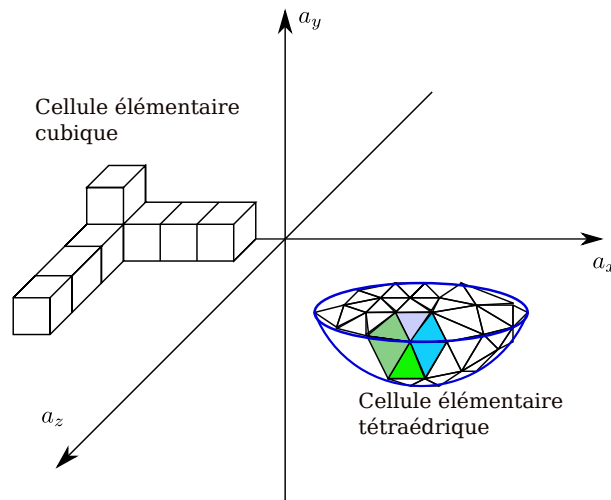


FIGURE 1.9 – Exemple de choix de maillage

1.3 Approches analytiques de l'inversion

Dans une approche analytique, on cherche la solution du problème d'une manière analytique ($\mathcal{S}^\dagger : x = \mathcal{S}^\dagger(y)$), en retardant la discrétisation des variables jusqu'à la dernière étape. L'avantage d'une telle approche est la rapidité de calcul comparée à d'autres méthodes. Par contre, elle est non robuste face aux changements de conditions d'application (bruit, données manquantes, manque de projections), ce qui la rend inutilisable dans des problèmes réels.

Dans le cadre de l'imagerie étudiée dans la partie précédente, la solution analytique existe dans le cas de la tomographie classique et la tomographie de diffraction. Il existe deux approches : la première se base sur l'inversion analytique de l'opérateur de projection / propagation et la deuxième établit la solution en utilisant les propriétés des opérateurs faisant le lien avec le domaine de Fourier de l'objet.

1.3.1 Tomographie classique

Dans les méthodes de reconstruction analytique en tomographie classique, l'objectif est de trouver l'expression de l'objet en fonction des données. Pour des sources à rayonnement parallèle, les données s'obtiennent en faisant la transformée de Radon de l'objet. La méthode d'inversion consiste alors à retrouver l'objet en appliquant la transformée de Radon inverse. On peut également lier les données à la transformée de Fourier de l'objet grâce au théorème des coupes-projections. Ceci permet d'obtenir la solution en faisant la transformée de Fourier inverse. Ces méthodes de reconstruction font l'objet de nombreux sujets de recherche [PGM96, Hir97]. Nous présentons ici l'essentiel de ces deux approches en faisant référence aux travaux les plus importants dans la littérature.

Transformée inverse de Radon et rétro-projections filtrées

On définit la transformée de Radon inverse d'une variable y comme :

$$x(a_x, a_y) = \frac{1}{2\pi} \int_0^{\pi} \int_0^{\infty} \frac{\frac{\partial y(\theta, r)}{\partial r}}{r - a_x \cos(\theta) - a_y \sin(\theta)} dr d\theta. \quad (1.20)$$

Pour obtenir l'estimation de l'objet x , il suffit d'appliquer la formule ci-dessus sur les projections. Néanmoins, du point de vue pratique, cette expression est rarement utilisée à cause, d'une part, des approximations que l'on doit faire pour calculer la dérivée sur l'axe r et, d'autre part, du calcul de l'intégrale du fait de la singularité en r . La transformée de Radon inverse est composée de trois étapes : une dérivée, une transformée de Hilbert et une rétro-projection R_B . L'idée de la méthode des rétro-projections filtrées est de généraliser ce principe pour lutter contre les artéfacts. Elle consiste à filtrer les données et, ensuite, les faire passer par une étape de rétro-projection pour obtenir une estimation de l'objet x . Dans le cas général, on écrit :

$$h_x * x = R_P(h_y * y). \quad (1.21)$$

On définit le filtre h_x tel que $h_x * x$ soit une bonne approximation de x . Ensuite, le filtre h_y est déterminé de telle façon que $h_x = R_p(h_y)$. Il existe plusieurs choix pour le filtre h_y qui sont détaillés dans [CH80, SK85]. Sur la figure 1.10, nous montrons quelques exemples de filtres utilisés en pratique. Dans les configurations avec des sources divergentes 3D,

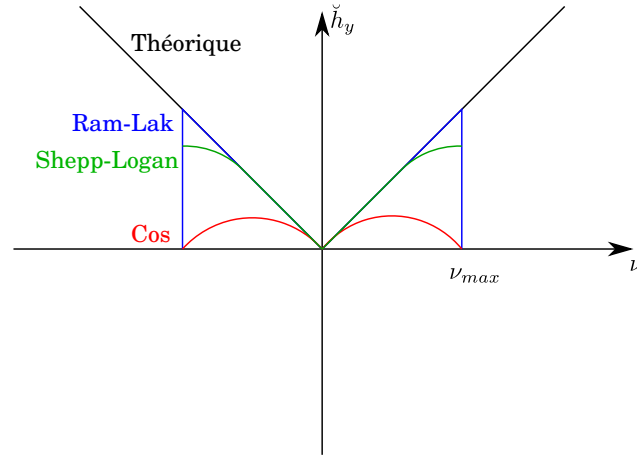


FIGURE 1.10 – La réponse fréquentielle du filtre théorique et de quelques filtres utilisés en pratique

plusieurs travaux ont été menés avec pour objectif une reconstruction analytique. La difficulté est que l'opérateur de projection, dans ce cas, n'est pas équivalent à la transformée de Radon 3D. Une méthode parmi les plus utilisées dans la littérature est la méthode de Feldkamp [FDK84]. Son principe consiste à reconstruire selon des plans 2D. Ensuite, on intègre les contributions sur les différents plans avec une pondération en fonction de leur angle avec le plan de source. Une méthode du genre rétro-projection filtrée est proposée par [Def94].

Inversion dans le domaine de Fourier

Une autre approche de reconstruction en tomographie classique est obtenue grâce au théorème des coupes-projections. En appliquant la transformée de Fourier sur les projections, on obtient les données dans le domaine de Fourier de l'objet. La reconstruction consiste alors à retrouver la transformée de Fourier inverse avec des données manquantes ; c'est un problème de synthèse de Fourier [MD88]. La méthode la plus simple de reconstruction nécessite trois étapes :

1. la transformée de Fourier de chaque projection $\mathcal{F}_r(y(\theta, r))$,
2. l'interpolation entre le maillage polaire des projections et le maillage cartésien de l'objet x (fig. 1.11),
3. la transformée de Fourier inverse pour obtenir une estimation de x .

L'étape d'interpolation est cruciale pour avoir une reconstruction de bonne qualité. En effet, un choix d'interpolation au plus proche voisin conduit à des artéfacts très importants dans l'objet reconstruit. Ce problème de traitement de données avec un maillage

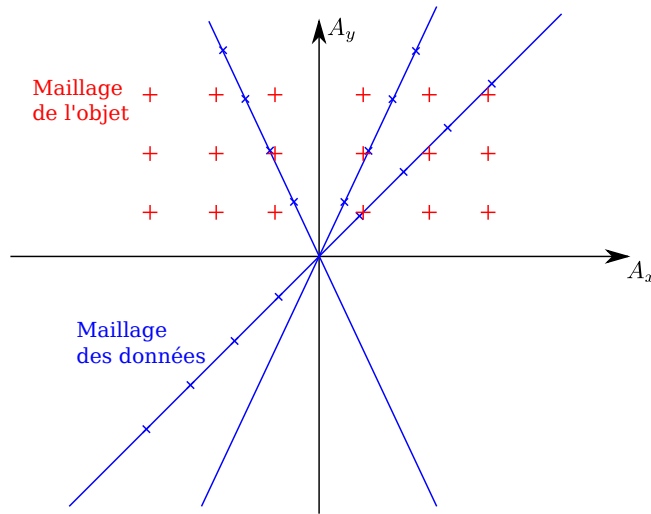


FIGURE 1.11 – Le problème de maillage dans les méthodes basées sur la transformée de Fourier inverse en tomographie classique

non uniforme a été étudié dans plusieurs domaines, par exemple en astronomie [Bro75] et en imagerie médicale [O'S85]. L'idée est de convoluer les données dans le domaine de Fourier avec un noyau adapté pour faire la transition vers le maillage cartésien de l'objet. L'algorithme de reconstruction contient quatre étapes principales :

1. transformée de Fourier des projections $\check{y} = \mathcal{F}_1(y)$,
2. convolution avec le noyau d'interpolation $\check{y}_h = \check{h} * \check{y}$,
3. transformée de Fourier inverse à partir d'un maillage cartésien de $hx = \mathcal{F}_2^{-1}(\check{y}_h)$,
4. compensation des valeurs du filtre h pour obtenir l'estimateur de x .

Plusieurs choix existent dans la littérature pour la fonction \check{h} comme les fonctions sinus cardinal et de Kaiser-Bessel (c.f. [JNM91] pour une comparaison des qualités de reconstruction de ces différentes fonctions).

1.3.2 Tomographie par diffraction

Comme nous l'avons souligné dans 1.2.2, la tomographie par diffraction est la généralisation de la tomographie classique au domaine des longueurs d'onde de l'ordre de grandeur de la dimension de l'objet à imager. Dans la littérature, les principes d'inversion analytique employés en tomographie classique sont aussi appliqués en tomographie de diffraction mais avec certaines différences. Ces différences sont dues, d'une part, à la modélisation directe et d'autre part à l'existence de plus d'informations liées à l'utilisation de plusieurs fréquences d'illumination. On classe les méthodes de reconstruction analytiques en deux catégories : rétro-propagations filtrées et inversion dans le domaine de Fourier.

Rétro-propagations filtrées

L'opérateur de propagation défini dans l'équation 1.10 est l'équivalent de la transformée de Radon en tomographie classique. En effet, pour une longueur d'onde qui tend vers zéro, l'opérateur de propagation tend vers l'opérateur de Radon à une constante près. Dans le même esprit que pour la méthode de rétro-projection, on définit la solution de l'inversion comme la rétro-propagation des données filtrées :

$$h_x * x = R_g(h_y * y), \quad (1.22)$$

où R_g est l'opérateur de rétro-propagation, h_x est choisi tel que $h_x * x$ soit une bonne approximation de x et h_y est choisi tel que $h_x = R_g(h_y)$. Ceci nécessite la connaissance de l'expression analytique de l'opérateur de rétro-propagation. Cette expression est donnée dans [Dev92] :

$$R_g(y)(\vec{r}) = - \int y(\vec{r}') \exp(-ik\vec{a}_\theta(\vec{r} - \vec{r}')) \frac{\partial}{\partial r} [G(\vec{r} - \vec{r}') - G(\vec{r}_\parallel - \vec{r}')] d\vec{r}', \quad (1.23)$$

où \vec{r}_\parallel est le point symétrique de \vec{r} par rapport à \mathcal{S} (le domaine de mesure). On peut alors résumer la méthode de reconstruction en trois étapes :

1. filtrage des projections y par le filtre h_y ,
2. rétro-propagation du résultat dans le domaine de l'objet \mathcal{D} ,
3. sommation complexe pour les différents angles de projection.

Des nombreuses applications de ces méthodes ont été étudiées dans la littérature. On se référera à [Dev82] pour la tomographie de diffraction en général et [WT87] pour les applications en géophysique.

Inversion dans le domaine de Fourier

La transformée de Fourier des projections y_u permet de calculer des points localisés dans le domaine de Fourier sur des cercles de rayon k . En principe, il suffit de faire la transformée de Fourier inverse pour obtenir la reconstruction de l'objet (bien sûr, limitée à la fréquence spatiale de $\sqrt{2}k$ dans le cas de la tomographie en transmission et à $2k$ dans le cas de la réflexion). En pratique, cette méthode n'est pas applicable comme telle à cause des erreurs liées à l'interpolation entre le maillage irrégulier défini par les cercles et le maillage cartésien du plan spectral (fig. 1.12). On suit le même schéma proposé que celui dans le paragraphe 1.3.1 avec une étape en plus liée à la singularité de la transformée de Fourier des projections \check{y}_u [NW01]. Pour cela, on procède à une transformée de Fourier à pas irrégulier à la place de la transformée de Fourier discrète. Dans le contexte d'une configuration de mesure à plusieurs fréquences d'excitation [PPB99], les données remplissent mieux l'espace de Fourier puisque le rayon des cercles dépend de la longueur d'onde. Les hautes fréquences permettent d'avoir des données aux hautes fréquences spatiales. On a intérêt à faire la reconstruction simultanément pour toutes les fréquences afin de profiter au maximum des données disponibles mais il faut une normalisation adaptée vu que la partie réelle et la partie imaginaire du contraste n'ont pas la même dépendance en fréquence. Le problème ne se pose pas dans le cas de milieux sans pertes (cf, [FDM05]).

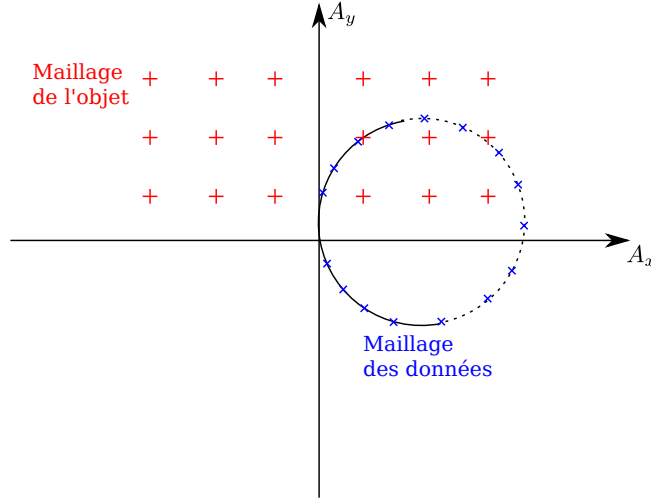


FIGURE 1.12 – Le problème de maillage dans les méthodes basées sur la transformé de Fourier inverse en tomographie de diffraction

1.4 Approches numériques de l'inversion

Les méthodes analytiques d'inversion sont certes rapides mais elles souffrent de plusieurs limitations : manque de robustesse vis-à-vis des changements dans la configuration de mesure, mauvaise qualité de reconstruction pour des angles d'incidence et d'observation limités et manque de souplesse dans le choix de la fonction de régularisation. De plus, elles ne sont applicables que dans le cas de l'imagerie de diffraction à faible contraste. C'est pourquoi, nous avons choisi dans ce travail de développer une approche d'inversion discrète qui permet plus de flexibilité dans le choix de la fonction de régularisation. Dans cette approche, nous commençons par la discrétisation du modèle direct dans le cas linéaire (en tomographie classique et tomographie de diffraction) :

$$\mathbf{y} = \mathbf{H}\mathbf{x}, \quad (1.24)$$

et dans le cas non linéaire (bilinéaire) en imagerie de diffraction :

$$\mathbf{y} = \mathbf{G}^o \mathbf{X} \mathbf{E}, \quad (1.25)$$

$$\mathbf{E} = \mathbf{E}^o + \mathbf{G}^c \mathbf{X} \mathbf{E}, \quad (1.26)$$

où \mathbf{X} est une matrice diagonale dont les éléments sont ceux de \mathbf{x} (i.e. $\mathbf{X} = \mathbf{Diag}(\mathbf{x})$).

Ensuite, une approche de régularisation déterministe ou probabiliste est employée pour retrouver l'image de l'objet \mathbf{x} . On peut classer également ces méthodes en fonction de la manière dont elles traitent la non linéarité du modèle (fig. 1.13).

Dans ce qui suit, nous présentons les deux classes de méthodes d'inversion numériques. La première est l'approche déterministe où les termes d'adéquation aux données et les contraintes de régularisation sont exprimés sous forme de normes vectorielles (souvent d'ordre 2) et la solution nécessite la résolution d'un problème d'optimisation. La

seconde est probabiliste : nos connaissances du problème sont exprimées sous forme de lois de probabilité. Parmi ces méthodes probabilistes, nous choisissons l'approche bayésienne qui cherche à construire les lois de probabilité *a posteriori* des inconnues connaissant les données en s'appuyant sur la règle de Bayes. Ensuite, nous calculons la solution qui maximise cette loi (estimateur MAP) ou la solution correspondant à l'espérance (estimateur EP). Cette approche permet d'inclure des informations *a priori* sur l'objet d'une manière transparente.

1.4.1 Méthodes déterministes

Les méthodes de reconstruction en tomographie classique sont un sujet de recherche très important depuis une quarantaine d'années de par leur intérêt dans le domaine de l'imagerie médicale. Elles sont principalement inspirées des travaux sur l'inversion des problèmes linéaires ainsi que des travaux de Tikhonov [Tik63] sur la régularisation des problèmes inverses mal posés. C'est aussi le cas de la tomographie par diffraction basée sur un modèle linéaire. Par contre, il a fallu attendre les années 90 pour avoir des méthodes de reconstruction traitant du problème d'imagerie de diffraction dans un cadre non linéaire [JPH91, CW90].

Dans une approche déterministe du problème inverse, on écrit une fonction coût dépendant de la variable inconnue x qui contient souvent deux termes. Le premier assure l'adéquation entre les données et la sortie du modèle. Le second décrit les contraintes de régularisation imposées sur l'objet. Prenons le cas linéaire avec une norme d'erreur quadratique et une régularisation quadratique, ce qui correspond à la régularisation au sens de Tikhonov :

$$\mathcal{J}(x) = \|y - Hx\|_2^2 + \Lambda \|\Gamma x\|_2^2, \quad (1.27)$$

avec $\Lambda > 0$ le paramètre de régularisation qui assure l'équilibre entre la fidélité aux données et la fonction de régularisation et Γ la matrice de Tikhonov, qui est souvent choisie comme la matrice d'identité. Le problème d'optimisation consistant à trouver $x = \min \mathcal{J}(x)$ est un problème d'optimisation convexe dont la solution est :

$$\hat{x} = (H^t H + \Lambda \Gamma^t \Gamma)^{-1} H^t y. \quad (1.28)$$

En pratique, le calcul direct de la solution précédente n'est pas faisable à cause des dimensions importantes des matrices. Souvent, une méthode itérative est utilisée comme la descente de gradient. Pour des critères plus complexes qui n'assurent pas la convexité de la fonction coût, les méthodes itératives ne sont pas applicables car les solutions sont locales. D'autres méthodes d'optimisation sont utilisées comme le gradient stochastique, les algorithmes génétiques et l'optimisation par essais particuliers (particle swarm optimization).

D'une manière générale, les méthodes d'inversion diffèrent par un ou plusieurs éléments :

- la façon de traiter le problème de non linéarité : linéarisation, bilinéarité,
- les normes utilisées dans la mesure d'erreur entre les données et la sortie du modèle : norme euclidienne , norme L_1 , ...
- le nombre de termes de régularisation et le nombre de variables incluses dans l'optimisation,

- la nature des fonctions de régularisation : quadratique, dérivée douce, variation totale,
- la méthode d'optimisation utilisée : itérative, génétique, ...
- l'approche du problème direct pour les méthodes d'inversion basées sur la solution du problème direct.

Ce problème de reconstruction est ainsi le sujet de recherche de nombreuses équipes. Dans ce qui suit, nous présentons brièvement les principales méthodes que l'on trouve dans la littérature. Ensuite, nous détaillons les méthodes les plus utilisées. Notons que nous admettons ne survoler qu'une partie des travaux réalisés et nous sommes loin de couvrir la totalité des travaux.

Présentation générale

Nous présentons en premier lieu les méthodes de reconstruction en tomographie linéaire (classique et de diffraction). La méthode de Kaczmarz [Kac37] (ART, SART) résout un système d'équations linéaires d'une manière itérative en le divisant en plusieurs sous-systèmes. Cette méthode a eu beaucoup de succès [GBH70] grâce à sa rapidité et sa qualité de reconstruction. Elle a été généralisée dans le cas de la tomographie de diffraction [LD91a]. Dans la classe des méthodes basées sur la régularisation de Tikhonov, on retrouve les travaux de [WSH03] pour une contrainte de douceur sur l'objet tout en gardant un temps de reconstruction raisonnable. On trouve aussi les approches de [SLJB07, DB95] avec un *a priori* de variation totale (TV) qui permettent de reconstruire des objets homogènes par morceaux mais l'algorithme devient lent en termes de temps de calcul.

Pour le problème non linéaire, les méthodes varient selon la manière dont elles traitent la non linéarité. Une des méthodes connues est la méthode de Born itérative ("Born Iterative Method" BIM) [LLS04] et la méthode de Born itérative distordue ("Distorted Born Iterative Method" DBIM) [CW90, YYL09]. Cette dernière est basée sur une représentation bilinéaire et consiste en une recherche alternée du champ total dans l'objet et d'une estimation linéaire du contraste. Dans [BS03], on propose une estimation simultanée contraste-champ par une méthode de gradient modifiée où le champ \mathbf{E} et le contraste sont estimés sous forme de série. Cette méthode permet d'éviter des temps de calcul importants pour la résolution du problème direct.

Une autre approche, basée sur une représentation bilinéaire du contraste et de la densité de courants (CSI : contraste source inversion), est proposée par [vdBK97]. Son principe repose sur la description d'une fonction de coût bivariée tenant compte des équations d'observation et de couplage. Il existe plusieurs extensions de cette méthode afin de prendre en compte des données multi-fréquentielles [HvdBK98] et d'utiliser une régularisation par variation totale [vdBvBA99]. L'optimisation du critère non linéaire par la méthode de Newton est présentée dans [JPH91]. L'idée est d'utiliser la méthode de Netwon-Kantorovich pour l'optimisation. Il a été démontré que cette approche était équivalente à la méthode DBIM [RvdB00]. Une méthode quasi-Newton est donnée dans [FT03].

Récemment, plusieurs travaux ont été menés pour améliorer les performances des méthodes présentées précédemment. Une approche dite "trilinéaire" est présentée dans [BIGL07]. On prend en compte trois équations du modèle direct (équation d'observation,

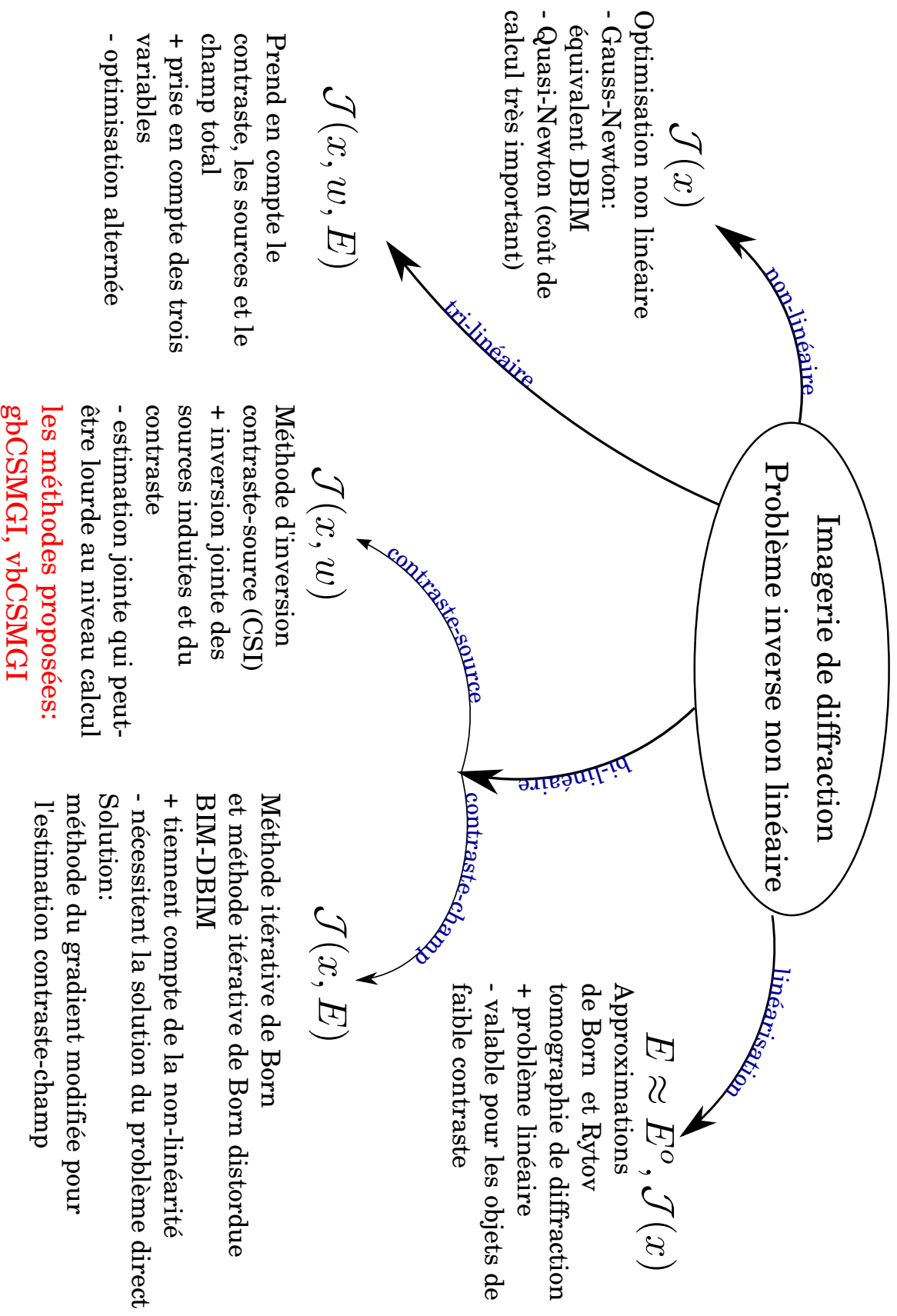


FIGURE 1.13 – Classification des méthodes d'inversion en imagerie de diffraction en fonction du traitement de la non linéarité du problème

de couplage et l'équation constitutive qui lie le champ total à la densité de courants) pour permettre une meilleure reconstruction. D'autres auteurs [AvdB02] proposent une régularisation multiplicative à la place de la régularisation additive de Tikhonov. Ces variantes ont été appliquées pour des approches de Newton [ZFEG07] et CSI [LAvdB09]. Une prise en compte des informations morphologiques de l'objet avec une approche contraste-source est donnée dans [CCUI09]. Une régularisation nommée "value picking" est proposée par [ZF09] pour la reconstruction des objets constants par morceaux.

Méthode ART

Dans une méthode d'inversion par blocs de Kaczmarz, on calcule la solution d'un système d'équations linéaires en découpant les données \mathbf{y} en plusieurs sous-parties \mathbf{y}_m , $m = 1, \dots, M'$:

$$\mathbf{y} = \mathbf{H}\mathbf{x}, \quad \mathbf{y}_m = \sum_{n=1}^N h_{m,n}x_n. \quad (1.29)$$

La solution du système d'équations s'obtient d'une manière itérative sous la forme,

$$\mathbf{x}^{k+1} = \mathbf{x}^k + \Lambda^k \frac{(\mathbf{y}_m - \langle \mathbf{h}_m, \mathbf{x}^k \rangle)}{\|\mathbf{h}_m\|_2^2} \mathbf{h}_m, \quad (1.30)$$

où \mathbf{h}_m est la ligne m de la matrice \mathbf{H} :

$$\mathbf{h}_m = \begin{pmatrix} h_{m,1} \\ h_{m,2} \\ \vdots \\ h_{m,N} \end{pmatrix} \quad (1.31)$$

et $m = k \bmod M' + 1$. Si on choisit $M' = M$, l'algorithme se transforme en une méthode de descente par coordonnées. Cette méthode correspond à la technique de reconstruction algébrique (ART) présentée par [GBH70]. En effet, chaque pixel est corrigé par une mesure correspondant au rayon qui passe à travers pour une projection donnée à une itération donnée. Grâce aux itérations, on couvre l'ensemble de toutes les projections.

Une autre variante de cette méthode est utilisée en tomographie classique quand on prend $M' = N_{\text{projections}}$ comme nombre de projections. Ceci permet de corriger un pixel à une itération donnée en utilisant toutes les données provenant des rayons qui le traversent. Cette méthode de reconstruction algébrique simultanée (SART) est proposée par [AK84].

On remarque que, pour $M' = 1$, l'algorithme est équivalent à une méthode de descente de gradient. Une méthode basée sur une extension de l'algorithme au cas aléatoire est discutée dans [CHJ09].

Méthode de Born itérative (BIM-DBIM) : (bilinéaire \mathbf{E}, \mathbf{x})

Cette méthode fait partie des premières méthodes itératives utilisées pour la reconstruction en imagerie de diffraction [CW90]. Elle adopte une représentation bilinéaire du modèle direct :

$$\mathbf{y} = \mathbf{G}^o \mathbf{E} \mathbf{x}, \quad (1.32)$$

$$\mathbf{E} = \mathbf{E}^o + \mathbf{G}^c \mathbf{X} \mathbf{E}. \quad (1.33)$$

L'équation d'observation est utilisée pour écrire une fonction de coût sur le contraste :

$$\mathcal{J}(\mathbf{x}) = \frac{\|\mathbf{y} - \mathbf{G}^o \mathbf{E} \mathbf{x}\|_2^2}{\|\mathbf{y}\|_2^2} + \Lambda \|\mathbf{x}\|_2^2, \quad (1.34)$$

où

$$\mathbf{E} = (\mathbf{I} - \mathbf{G}^c \mathbf{X})^{-1} \mathbf{E}^o. \quad (1.35)$$

Si on remplace \mathbf{E} par sa valeur dans la fonction coût, elle devient non linéaire par rapport à \mathbf{x} . Pour éviter ce problème, on utilise l'approximation de Born dans un cadre itératif où on estime \mathbf{x} et \mathbf{E} d'une manière disjointe. On redéfinit la fonction coût d'une manière itérative comme suit :

$$\mathcal{J}(\mathbf{x}_{k+1}) = \frac{\|\mathbf{y} - \mathbf{G}^o \mathbf{E}_k \mathbf{x}_{k+1}\|_2^2}{\|\mathbf{y}\|_2^2} + \Lambda \frac{\|\mathbf{x}_{k+1}\|_2^2}{\|\mathbf{x}_k\|_2^2}. \quad (1.36)$$

On obtient les valeurs de \mathbf{x}_{k+1} en optimisant la fonction précédente. Le résultat est ensuite utilisé pour calculer une nouvelle estimation du champ total \mathbf{E}^{k+1} par résolution du problème direct. Les étapes de l'algorithme sont les suivantes :

1. initialisation de $\mathbf{E} = \mathbf{E}^o$ par l'approximation de Born,
2. pour l'itération k , on obtient \mathbf{x}_k en optimisant $\mathcal{J}(\mathbf{x}_k)$. Ce problème d'optimisation a une solution qui s'écrit sous la forme :

$$\mathbf{x}_k = \left(\mathbf{E}_{k-1}^h \mathbf{G}^{oh} \mathbf{G}^o \mathbf{E}_{k-1} + \Lambda \frac{\|\mathbf{y}\|_2^2}{\|\mathbf{x}_{k-1}\|_2^2} \right)^{-1} \mathbf{E}_{k-1}^h \mathbf{G}^{oh} \mathbf{y}. \quad (1.37)$$

Souvent ce calcul nécessite une méthode de gradient à cause de la dimension importante de la matrice \mathbf{G}^o ,

3. utilisation de \mathbf{x}_k pour résoudre le problème direct et obtenir \mathbf{E}_k :

$$\mathbf{E}_k = (\mathbf{I} - \mathbf{G}^c \mathbf{X}_k)^{-1} \mathbf{E}^o. \quad (1.38)$$

La solution du problème direct se fait aussi d'une manière itérative.

Une variante de cette méthode définit la fonction coût en fonction de la variation du contraste $\delta \mathbf{x}_k$:

$$\mathcal{J}(\mathbf{x}_{k+1}) = \frac{\|\delta \mathbf{y} - \mathbf{G}_k^x \delta \mathbf{x}_{k+1}\|_2^2}{\|\mathbf{y}\|_2^2} + \Lambda \frac{\|\delta \mathbf{x}_{k+1}\|_2^2}{\|\mathbf{x}_k\|_2^2}, \quad (1.39)$$

avec $\delta \mathbf{y} = \mathbf{y} - \mathbf{G}^o \mathbf{E}_k \mathbf{x}_k$, $\mathbf{x}_{k+1} = \mathbf{x}_k + \delta \mathbf{x}_{k+1}$ et l'opérateur \mathbf{G}_k^x est défini comme :

$$\mathbf{G}_k^x = \mathbf{G}^o (\mathbf{I} - \mathbf{G}^c \mathbf{X}_k)^{-1} \mathbf{E}^o. \quad (1.40)$$

Pour obtenir l'estimation du contraste, on utilise le même schéma que celui proposé pour BIM . Cette méthode converge en un faible nombre d'itérations mais chaque itération prend un temps important car elle nécessite la résolution du problème direct. Cette approche a été appliquée en résolvant le problème direct avec la méthode FDTD [CLH06] et avec la méthode des moments [LLS04].

Avec la méthode de gradient modifiée présentée par [BS03], on cherche les valeurs de \mathbf{E} et \mathbf{x} d'une manière itérative :

$$\mathbf{E}_n = \mathbf{E}_{n-1} + a_n \mathbf{d}_{n,E}, \quad (1.41)$$

$$\mathbf{x}_n = \mathbf{x}_{n-1} + b_n \mathbf{d}_{n,x}. \quad (1.42)$$

Les pas de descente a_n, b_n sont obtenus comme suit :

$$\{a_n, b_n\} = \arg \min \left(\mathcal{J}(\mathbf{E}, \mathbf{x}) = \frac{\sum_{\theta} \|\mathbf{y} - \mathbf{G}^o \mathbf{x}_n \mathbf{E}_n\|_2^2}{\sum_{\theta} \|\mathbf{y}\|_2^2} + \frac{\sum_{\theta} \|\mathbf{E}^o - \mathbf{E}_{n-1} + \mathbf{G}^c \mathbf{x}_n \mathbf{E}_n\|_2^2}{\sum_{\theta} \|\mathbf{E}^o\|_2^2} \right). \quad (1.43)$$

Pour imposer la positivité du contraste \mathbf{x} , on le cherche sous la forme $\mathbf{x} = \mathbf{x}^{\dagger 2}$. L'expression de mise à jour devient :

$$\mathbf{x}_n^{\dagger} = \mathbf{x}_{n-1}^{\dagger} + b_n^{\dagger} \mathbf{d}_{n,x^{\dagger}}. \quad (1.44)$$

Les directions de descente sont obtenues à partir de la direction de gradient conjugué de Polak-Ribière :

$$\mathbf{d}_{n,x^{\dagger}} = \mathbf{c}_{n,x^{\dagger}} + \frac{\langle \mathbf{c}_{n,x^{\dagger}}, \mathbf{c}_{n,x^{\dagger}} - \mathbf{c}_{n-1,x^{\dagger}} \rangle}{\|\mathbf{c}_{n-1,x^{\dagger}}\|_2^2} \mathbf{d}_{n-1,x^{\dagger}} \quad (1.45)$$

$$\mathbf{d}_{n,E} = \mathbf{c}_{n,E} + \frac{\langle \mathbf{c}_{n,E}, \mathbf{c}_{n,E} - \mathbf{c}_{n-1,E} \rangle}{\|\mathbf{c}_{n-1,E}\|_2^2} \mathbf{d}_{n-1,E}, \quad (1.46)$$

avec

$$\mathbf{c}_{n,x^{\dagger}} = 2x_{n-1}^{\dagger} \Re \left(\frac{\sum_{\theta} \mathbf{E}_{n-1}^* \mathbf{G}^{cH} (\mathbf{E}^o - \mathbf{E}_{n-2} + \mathbf{G}^c \mathbf{x}_{n-1} \mathbf{E}_{n-1})}{\sum_{\theta} \|\mathbf{E}^o\|_2^2} - \frac{\sum_{\theta} \mathbf{E}_{n-1}^* \mathbf{G}^{oH} (\mathbf{y} - \mathbf{G}^o \mathbf{x}_{n-1} \mathbf{E}_{n-1})}{\sum_{\theta} \|\mathbf{y}\|_2^2} \right), \quad (1.47)$$

$$\mathbf{c}_{n,E} = \frac{(\mathbf{x}_{n-1}^* \mathbf{G}^{cH} - \mathbf{I}) (\mathbf{E}^o - \mathbf{E}_{n-2} + \mathbf{G}^c \mathbf{x}_{n-1} \mathbf{E}_{n-1})}{\sum_{\theta} \|\mathbf{E}^o\|_2^2} - \frac{\mathbf{x}_{n-1}^* \mathbf{G}^{oH} (\mathbf{y} - \mathbf{G}^o \mathbf{x}_{n-1} \mathbf{E}_{n-1})}{\sum_{\theta} \|\mathbf{y}\|_2^2}. \quad (1.48)$$

Le nombre d'itérations peut être réduit en modifiant le gradient du champ total de la manière suivante :

$$\mathbf{E}_n = \mathbf{E}_{n-1} + a_{n,1} \mathbf{d}_{n,E} + a_{n,2} ((\mathbf{I} - \mathbf{G}^c \mathbf{x}_{n-1})^{-1} \mathbf{E}^o - \mathbf{E}_{n-1}). \quad (1.49)$$

Méthode d'inversion contraste-source (CSI) : (bilinéaire w, x)

La méthode d'inversion contraste-source (CSI) est une des méthodes les plus utilisées dans la littérature pour la reconstruction d'objet en imagerie de diffraction. Elle utilise

une représentation bilinéaire du modèle direct en fonction de la densité de courants \mathbf{w} et du contraste \mathbf{x} . En multipliant l'équation de couplage par le contraste et en remplaçant la densité de courant par sa valeur $\mathbf{w} = \mathbf{X}\mathbf{E}$, on réécrit le modèle direct sous la forme :

$$\mathbf{y} = \mathbf{G}^o \mathbf{w}, \quad (1.50)$$

$$\mathbf{w} = \mathbf{X}\mathbf{E}^o + \mathbf{X}\mathbf{G}^c \mathbf{w}. \quad (1.51)$$

On définit la fonction de coût jointe des deux inconnues :

$$\mathcal{J}(\mathbf{w}, \mathbf{x}) = \frac{\|\mathbf{y} - \mathbf{G}^o \mathbf{w}\|_2^2}{\|\mathbf{y}\|_2^2} + \frac{\|\mathbf{w} - \mathbf{X}\mathbf{E}^o - \mathbf{X}\mathbf{G}^c \mathbf{w}\|_2^2}{\|\mathbf{X}\mathbf{E}^o\|_2^2}. \quad (1.52)$$

Pour l'optimisation, on propose une méthode itérative avec une mise à jour alternée de \mathbf{w} et \mathbf{x} . Commençons par définir les termes d'erreur ϵ et ξ dans les équations d'observation et de couplage, respectivement :

$$\epsilon_k = \mathbf{y} - \mathbf{G}^o \mathbf{w}_k, \quad \text{observation,} \quad (1.53)$$

$$\xi_k = \mathbf{X}_k \mathbf{E}^o + \mathbf{X}_k \mathbf{G}^c \mathbf{w}_k - \mathbf{w}_k \quad \text{couplage.} \quad (1.54)$$

A l'itération k , la mise à jour de \mathbf{w} s'écrit :

$$\mathbf{w}_k = \mathbf{w}_{k-1} + a_k d_k, \quad (1.55)$$

où a_k est le pas et d_k est la direction de descente, cette dernière étant ici choisie comme celle de Polak-Ribière :

$$d_0 = 0 \quad (1.56)$$

$$d_k = d'_k + \frac{\langle d'_k, d'_k - d'_{k-1} \rangle}{\langle d'_{k-1}, d'_{k-1} \rangle} d_{k-1}, \quad \forall k > 0, \quad (1.57)$$

avec

$$d'_k = -\frac{\mathbf{G}^{oH} \epsilon_{k-1}}{\|\mathbf{y}\|_2^2} - \frac{\xi_{k-1} - \mathbf{G}^{cH} \mathbf{X}_{k-1}^H \xi_{k-1}}{\|\mathbf{X}_{k-1} \mathbf{E}^o\|_2^2}. \quad (1.58)$$

Le pas a_k minimise la fonction de coût $\mathcal{J}(\mathbf{w}, \mathbf{x})$. Son expression est donnée par :

$$a_k = \left(\frac{\langle \epsilon_{k-1}, \mathbf{G}^o d_k \rangle}{\|\mathbf{y}\|_2^2} + \frac{\langle \xi_{k-1}, d_k - \mathbf{X}_{k-1} \mathbf{G}^c d_k \rangle}{\|\mathbf{X}_{k-1} \mathbf{E}^o\|_2^2} \right) \times \left(\frac{\|\mathbf{G}^o d_k\|_2^2}{\|\mathbf{y}\|_2^2} + \frac{\|d_k - \mathbf{X}_{k-1} \mathbf{G}^c d_k\|_2^2}{\|\mathbf{X}_{k-1} \mathbf{E}^o\|_2^2} \right). \quad (1.59)$$

Le champ total s'obtient via l'expression :

$$\mathbf{E}_k = \mathbf{E}_{k-1} + a_k \mathbf{G}^c d_k. \quad (1.60)$$

Pour l'estimation de \mathbf{x} , le critère \mathcal{J} est non linéaire. On linéarise alors le critère sous la forme :

$$\mathcal{J}'(\mathbf{x}) = \|\mathbf{X}\mathbf{E}_k - \mathbf{w}_k\|_2^2 \quad (1.61)$$

et la solution s'obtient alors facilement :

$$\Re(\mathbf{x}_k) = \frac{\sum_{\theta} \Re(\mathbf{E}_k^H \mathbf{w}_k)}{\|\mathbf{E}_k\|_2^2}, \quad (1.62)$$

$$\Im(\mathbf{x}_k) = \frac{\sum_{\theta} \Im(\mathbf{E}_k^H \mathbf{w}_k)}{\|\mathbf{E}_k\|_2^2}. \quad (1.63)$$

Les choix de régularisation (quadratique, variation totale, contrainte de positivité) sont discutés dans [vdBK97, vdBvBA99].

Cette méthode permet d'estimer les courants et le contraste en même temps et sans avoir besoin de résoudre le problème direct. Néanmoins, elle nécessite plus d'itérations pour converger que la méthode de Born itérative.

Méthode de Newton : (non linéaire)

Dans cette approche, on définit une fonction de coût non linéaire à partir des équations d'observation et de couplage :

$$\mathcal{J}(\mathbf{x}) = \frac{\|\mathbf{y} - \mathbf{G}^o \mathbf{X} (\mathbf{I} - \mathbf{X} \mathbf{G}^c)^{-1} \mathbf{E}^o\|_2^2}{\|\mathbf{y}\|_2^2} = \frac{\|\mathbf{y} - \hat{\mathbf{y}}\|_2^2}{\|\mathbf{y}\|_2^2}. \quad (1.64)$$

L'optimisation directe de cette fonction n'est pas faisable en pratique à cause de la non linéarité et des dimensions très importantes du système. Pour cette raison, une approximation linéaire autour d'un point de travail est proposée. Une des méthodes utilisées pour réaliser cette approximation est la méthode de Newton. Elle consiste à approcher la fonction coût par ses dérivées première et seconde (le gradient \mathbf{g} et le hessien \mathbf{h} , respectivement) :

$$\mathbf{g} = \begin{pmatrix} \frac{\partial \mathcal{J}}{\partial \mathbf{x}} \\ \frac{\partial \mathcal{J}}{\partial \mathbf{x}^*} \end{pmatrix} \quad (1.65)$$

$$\mathbf{h} = \begin{pmatrix} \frac{\partial^2 \mathcal{J}}{\partial \mathbf{x} \partial \mathbf{x}} & \frac{\partial^2 \mathcal{J}}{\partial \mathbf{x} \partial \mathbf{x}^*} \\ \frac{\partial^2 \mathcal{J}}{\partial \mathbf{x}^* \partial \mathbf{x}} & \frac{\partial^2 \mathcal{J}}{\partial \mathbf{x}^* \partial \mathbf{x}^*} \end{pmatrix} \quad (1.66)$$

Dans notre cas, la fonction coût est quadratique et le gradient s'écrit :

$$\mathbf{g} = - \begin{pmatrix} \mathbf{J}^t (\mathbf{y} - \hat{\mathbf{y}})^* \\ \mathbf{J}^H (\mathbf{y} - \hat{\mathbf{y}}) \end{pmatrix}, \quad (1.67)$$

avec \mathbf{J} la matrice jacobienne :

$$\mathbf{J} = \frac{1}{\|\mathbf{y}\|_2^2} \begin{pmatrix} \frac{\partial \hat{y}(1)}{\partial x(1)} & \cdots & \frac{\partial \hat{y}(1)}{\partial x(N)} \\ \vdots & \frac{\partial \hat{y}(r_m)}{\partial x(r_n)} & \vdots \\ \frac{\partial \hat{y}(M)}{\partial x(1)} & \cdots & \frac{\partial \hat{y}(M)}{\partial x(N)} \end{pmatrix} \quad (1.68)$$

et \mathbf{h} la matrice hessienne :

$$\mathbf{h} = \frac{1}{\|\mathbf{y}\|_2^2} \begin{pmatrix} \mathbf{J}_2 & \mathbf{J}^t \mathbf{J}^* \\ \mathbf{J}^H \mathbf{J} & \mathbf{J}_2^* \end{pmatrix}, \quad (1.69)$$

avec

$$\mathbf{J}_2(m, n) = - \left(\frac{\partial^2 \hat{\mathbf{y}}}{\partial x(m) \partial x(n)} \right)^t (\mathbf{y} - \hat{\mathbf{y}})^*. \quad (1.70)$$

On cherche la solution de ce problème d'une manière itérative. On définit donc la solution à une itération $k+1$ comme la solution à l'itération précédente k corrigée d'une quantité déterminée à partir du gradient et du hessien de la matrice :

$$\mathbf{x}_{k+1} = \mathbf{x}_k + \delta \mathbf{x}_k, \quad (1.71)$$

$$\begin{pmatrix} \delta \mathbf{x}_k \\ \delta \mathbf{x}_k^* \end{pmatrix} = -\bar{h}_k^{-1} \mathbf{g}_k. \quad (1.72)$$

Néanmoins le calcul de la matrice hessienne est compliqué, ce qui rend cette approche peu pratique. Une première approximation du problème consiste à approcher, dans la sortie du modèle, la différence d'une manière linéaire :

$$\delta \hat{\mathbf{y}}_k = \hat{\mathbf{y}}_k - \hat{\mathbf{y}}_{k-1} \approx \mathbf{J}_k \delta \mathbf{x}_k, \quad (1.73)$$

avec

$$\delta \mathbf{x}_k = (\mathbf{J}_k^H \mathbf{J}_k)^{-1} \mathbf{J}_k^H (\mathbf{y} - \hat{\mathbf{y}}_k) \quad (1.74)$$

et

$$\mathbf{J}_k = \mathbf{G}^o (I - \mathbf{G}^c \mathbf{X}_k)^{-1} \mathbf{E}^o. \quad (1.75)$$

Cette approximation s'appelle la méthode de Newton-Kantorovich ou Gauss-Newton. Elle procure des résultats équivalents à la méthode de Born itérative distordue. Dans certaines applications, cette approximation fournit de mauvais résultats si le point initial est très loin de la solution.

Une deuxième approximation consiste à approcher l'inverse de la matrice hessienne d'une manière itérative selon la formule de mise à jour de Broyden-Fletcher-Goldfarb-Shanno (BFGS) [Avr03] :

$$\bar{h}_k^{-1} = \bar{h}_{k-1}^{-1} + \delta \bar{h}_{k-1}^{-1} \quad (1.76)$$

Ceci correspond à la méthode “quasi-Newton” proposée dans [FT03].

1.4.2 Méthodes probabilistes

Au contraire d'une approche déterministe, dans une approche probabiliste du problème inverse on modélise les variables inconnues sous forme probabiliste. Commençons par introduire la notion d'erreur ou de bruit dans le modèle direct. On réécrit les équations discrètes comme suit :

$$\mathbf{y} = \mathbf{H}\mathbf{x} + \boldsymbol{\epsilon}, \quad (1.77)$$

pour le problème linéaire et

$$\mathbf{y} = \mathbf{G}^o \mathbf{w} + \boldsymbol{\epsilon}, \quad (1.78)$$

$$\mathbf{w} = \mathbf{X}\mathbf{E}^o + \mathbf{X}\mathbf{G}^c \mathbf{w} + \boldsymbol{\xi}, \quad (1.79)$$

pour le modèle non linéaire. $\boldsymbol{\epsilon}$ et $\boldsymbol{\xi}$ regroupent trois termes d'erreur : le bruit de mesure, l'erreur de modèle et l'erreur de discrétisation.

La première étape de cette approche est la définition de la distribution de probabilité correspondant à ϵ et ξ . Justifiée par le théorème central limite, une loi normale multivariée centrée indépendante est souvent choisie :

$$p(\epsilon|\rho_\epsilon; \mathcal{M}) = \frac{1}{(2\pi\rho_\epsilon)^{\frac{M}{2}}} \exp\left(-\frac{\|\epsilon\|_2^2}{2\rho_\epsilon}\right). \quad (1.80)$$

Néanmoins, d'autres possibilités sont étudiées en pratique. Elles dépendent de la physique du problème [Mid99]. Des exemples sont la loi de Poisson [LCA07] ou la loi de Laplace [PK97]. Grâce au modèle direct, on peut retrouver la distribution de probabilité des données sachant le contraste :

$$p(\mathbf{y}|\mathbf{x}; \mathcal{M}) = p(\epsilon = \mathbf{y} - \mathbf{H}\mathbf{x}|\mathcal{M}). \quad (1.81)$$

On appelle cette distribution la vraisemblance du modèle. On distingue trois catégories d'approches probabilistes du problème inverse : les méthodes de maximum de vraisemblance, les méthodes de maximum d'entropie et les méthodes bayésiennes. Nous présentons d'abord brièvement les principes des deux premières approches, puis, nous détaillons, dans la prochaine section, l'approche bayésienne utilisée ici.

L'approche du maximum de vraisemblance

Dans cette approche, on ne prend en compte que la vraisemblance et on choisit le contraste qui maximise celle-ci :

$$\mathbf{x} = \arg \max_{\mathbf{x}} (p(\mathbf{y}|\mathbf{x})). \quad (1.82)$$

Sous l'hypothèse d'un bruit gaussien, la vraisemblance s'écrit :

$$p(\mathbf{y}|\mathbf{x}; \rho; \mathcal{M}) = \frac{1}{(2)^{\frac{M}{2}}} \exp\left(-\frac{\|\mathbf{y} - \mathbf{H}\mathbf{x}\|_2^2}{2\rho_\epsilon}\right). \quad (1.83)$$

En prenant l'inverse du logarithme de la vraisemblance et cherchant le minimum,

$$\hat{\mathbf{x}} = \arg \min_{\mathbf{x}} (-\log(p(\mathbf{y}|\mathbf{x}))) = \arg \min_{\mathbf{x}} (\|\mathbf{y} - \mathbf{H}\mathbf{x}\|_2^2), \quad (1.84)$$

la solution obtenue correspond à celle des moindres carrés. D'autres choix sont étudiés dans la littérature comme le bruit de Poisson proposé par [LC84] pour la reconstruction en tomographie classique. La solution maximisant la vraisemblance correspond au minimum d'un critère non linéaire :

$$\hat{\mathbf{x}} = \arg \min_{\mathbf{x}} (-\log(p(\mathbf{y}|\mathbf{x}))) = \arg \min_{\mathbf{x}} \sum_{m=1}^M (\hat{y}(m) - y(m) \log(\hat{y}(m))), \quad (1.85)$$

où $\hat{\mathbf{y}} = \mathbf{H}\mathbf{x}$. Une méthode EM (*Expectation-Maximization*) est proposée pour calculer la solution d'une manière itérative :

$$\mathbf{x}_{k+1} = \mathbf{x}_k \mathbf{H}^t \hat{\mathbf{Y}}_k^{-1} \mathbf{y}, \quad (1.86)$$

avec $\hat{\mathbf{Y}}_k = \text{Diag}(\mathbf{H}\mathbf{x}_k)$.

Les méthodes de maximum de vraisemblance restent peu intéressantes pour l'imagerie micro-onde où on a besoin d'introduire de l'information *a priori* afin d'améliorer la qualité de la reconstruction.

Approche du maximum d'entropie

L'approche du maximum d'entropie est très employée dans le domaine des problèmes inverses [MD94]. Elle a aussi été utilisée pour la reconstruction en tomographie classique [MD88] et l'imagerie de diffraction [NM94, BN88]. Cette approche présente trois variantes principales :

1. on suppose que la variable recherchée \mathbf{x} est une densité de probabilité, ce qui est acceptable dans les applications d'imagerie puisque la variable est positive. Ensuite, on cherche la solution qui maximise l'entropie de Shannon sous la contrainte du modèle direct :

$$\mathbf{x} = \arg \max_{\mathbf{x}} - \sum_{n=1}^N x(n) \log(x(n)), \quad s.c. \quad \mathbf{y} = \mathbf{H}\mathbf{x}, \quad (1.87)$$

2. une autre méthode consiste à définir la solution comme l'espérance d'une distribution $p(\mathbf{x})$ qui maximise l'entropie sous la contrainte du modèle direct. Elle s'appelle la méthode de maximum d'entropie avec moments :

$$\hat{\mathbf{x}} = \mathbf{E}(\mathbf{x}) = \int \mathbf{x}p(\mathbf{x})d\mathbf{x}, \quad (1.88)$$

3. la troisième variante consiste à définir la loi *a posteriori* utilisant la règle de Bayes et à choisir une loi *a priori* de maximum d'entropie.

1.4.3 Approche bayésienne

Dans une approche bayésienne du problème inverse, on définit une distribution *a posteriori* de l'image inconnue \mathbf{x} sachant les données \mathbf{y} en utilisant la règle de Bayes. Ensuite, on estime l'image en cherchant le maximum ou en calculant l'espérance. Nous discutons ici le principe de l'approche bayésienne dans le cas linéaire. Le cas non linéaire est discuté dans le paragraphe 3.2.2. On commence par la règle de Bayes qui définit la loi *a posteriori* :

$$p(\mathbf{x}|\mathbf{y}; \mathcal{M}) = \frac{p(\mathbf{y}|\mathbf{x}; \mathcal{M})p(\mathbf{x}|\mathcal{M})}{p(\mathbf{y}|\mathcal{M})}. \quad (1.89)$$

où

- $p(\mathbf{y}|\mathbf{x}; \mathcal{M})$ est la vraisemblance qu'on peut obtenir à partir du modèle direct et de la distribution de probabilité du bruit,
- $p(\mathbf{x}|\mathcal{M})$ est le modèle *a priori* qui représente les informations *a priori* disponibles sur l'objet représentées sous forme probabiliste. Le choix de ce modèle joue un rôle important pour la qualité de reconstruction et la complexité du calcul. Il correspond au terme de régularisation dans les méthodes d'inversion déterministes,
- $p(\mathbf{y}|\mathcal{M})$ est l'évidence du modèle. Elle représente la probabilité des données sachant le modèle. Son évaluation est essentielle pour la comparaison et le choix entre les différents modèles.

Pour l'estimation du contraste, il existe deux estimateurs classiques : le maximum *a posteriori* (MAP) :

$$\hat{\mathbf{x}} = \arg \max_{\mathbf{x}} (p(\mathbf{x}|\mathbf{y}; \mathcal{M})) \quad (1.90)$$

et l'espérance *a posteriori* (EAP) :

$$\hat{\mathbf{x}} = \mathbf{E}(\mathbf{x}) = \int \mathbf{x} p(\mathbf{x}) d\mathbf{x}. \quad (1.91)$$

Les approches se différencient généralement par le choix du modèle *a priori*, le choix de l'estimateur et la façon de le calculer. Dans ce qui suit nous survolons rapidement des travaux de reconstruction bayésiens en tomographie classique et en imagerie de diffraction.

Pour la tomographie classique, un choix d'*a priori* gaussien avec un estimateur MAP est proposé dans [HW83]. Un champ markovien est proposé par [SBS98] avec une estimation des hyper-paramètres du modèle. Une modélisation plus fine de l'objet est étudiée dans [MR06] avec un modèle de Markov hiérarchique.

En imagerie de diffraction, les travaux de [CMD97] étudient le lien entre les méthodes classiques et l'approche bayésienne. Un modèle *a priori* markovien a été proposé en tomographie de diffraction [PF03] et en imagerie de diffraction [BBP03]. Un modèle de Gauss-Markov-Potts avec un estimateur EAP basé sur l'échantillonnage stochastique est étudié dans [Fér06] pour l'imagerie micro-onde 2D. Récemment, une nouvelle modélisation du bruit sous forme complexe a été introduite [ELHK09] pour mieux prendre en compte la physique du problème.

Dans ce qui suit, nous présentons le lien avec le théorème de régularisation classique, le choix du modèle direct qui sera introduit dans le chapitre 3 et nous introduisons le calcul bayésien qui sera détaillé dans les chapitres 4 et 5.

Lien avec la régularisation classique

Prenons le cas d'un bruit gaussien et d'une loi *a priori* sous forme d'exponentielle d'une fonction potentielle $\varphi(\mathbf{x})$:

$$p(\mathbf{y}|\mathbf{x}, \rho_\epsilon; \mathcal{M}) = \frac{1}{(2\pi\rho_\epsilon)^{\frac{M}{2}}} \exp\left(-\frac{\|\mathbf{y} - \mathbf{H}\mathbf{x}\|_2}{2\rho_\epsilon}\right), \quad (1.92)$$

$$p(\mathbf{x}|\mathcal{M}) = \frac{1}{\Xi_x} \exp\left(-\frac{\Lambda\varphi(\mathbf{x})}{2}\right). \quad (1.93)$$

La loi *a posteriori* s'écrit :

$$p(\mathbf{x}|\mathbf{y}; \mathcal{M}) \propto \exp\left(-\frac{\|\mathbf{y} - \mathbf{H}\mathbf{x}\|_2}{2\rho_\epsilon} - \frac{\Lambda\varphi(\mathbf{x})}{2}\right). \quad (1.94)$$

Si on choisit un estimateur au sens du maximum *a posteriori*, il est facile de montrer que le problème d'optimisation revient à trouver le minimum du critère suivant :

$$\mathcal{J}(\mathbf{x}) = \frac{\|\mathbf{y} - \mathbf{H}\mathbf{x}\|_2}{2\rho_\epsilon} + \frac{\Lambda\varphi(\mathbf{x})}{2}. \quad (1.95)$$

Ceci correspond à la formulation de Tikhonov. Néanmoins, l'approche bayésienne présente plusieurs avantages par rapport à l'approche classique :

- le calcul permet d’avoir une loi de probabilité sur les inconnues, ce qui permet de définir non seulement l’estimation mais aussi un intervalle de confiance en calculant la variance,
- la représentation statistique des inconnues permet d’avoir un meilleur choix des lois selon la statistique du problème, comme le choix du bruit de Poisson ou l’*a priori* de mélange de gaussiennes,
- cette approche permet d’inclure l’estimation des hyper-paramètres (comme les paramètres de régularisation) d’une manière directe dans un même cadre comme nous le verrons dans 3.3.3,
- la nature probabiliste du problème permet d’introduire différentes techniques de calcul d’estimateurs comme les méthodes d’échantillonnage stochastique et l’approche bayésienne variationnelle,
- le choix de l’estimateur n’est pas limité au MAP.

Choix du modèle *a priori*

Le choix de la loi *a priori* est crucial pour la qualité de la reconstruction. Cet *a priori* doit traduire les informations disponibles sur l’objet tout en gardant une nature discriminative pour réduire l’espace des solutions admissibles et rendre la loi *a posteriori* mono-modale. Plusieurs choix ont été étudiés dans la littérature pour la fonction $\varphi(\mathbf{x})$. Un choix classique est la fonction quadratique $\varphi(\mathbf{x}) = \|\mathbf{x}\|_2^2$ qui permet d’obtenir un critère convexe facile à optimiser mais qui favorise une solution douce. La fonction correspondant à la norme L_1 , $\varphi(\mathbf{x}) = \|\mathbf{x}\|_1$, permet une meilleure conservation des contours mais avec plus de difficultés pour l’optimisation (fig. 1.14). Une bonne partie des fonctions utilisées dans la littérature est disponible dans [Jal01]. Les fonctions varient selon leur aptitude à préserver les contours, leur convexité et la difficulté de leur optimisation. [GG84] introduit les champs markoviens pour la modélisation *a priori* en traitement

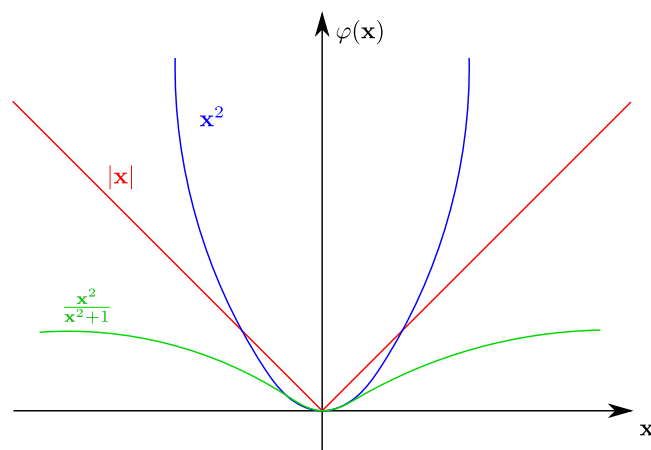


FIGURE 1.14 – Exemple de choix de la fonction d’énergie $\varphi(\cdot)$

d’image. La dépendance entre un pixel et les autres éléments de l’image est réduite à

une dépendance sur un voisinage \mathcal{V} de ce pixel :

$$\varphi(\mathbf{x}) = \sum_{\mathbf{r}} \sum_{\mathbf{r}' \in \mathcal{V}(\mathbf{r})} \varphi_l(x(\mathbf{r}), x(\mathbf{r}')). \quad (1.96)$$

Plusieurs choix de φ_l sont étudiés. Nous nous intéressons ici aux fonctions de différence $\varphi(x(\mathbf{r}), x(\mathbf{r}')) = \varphi(x(\mathbf{r}) - x(\mathbf{r}'))$ dans les cas continu et discret, notamment à la fonction de différence quadratique (Gauss-Markov) :

$$\varphi_l(x(\mathbf{r}) - x(\mathbf{r}')) = |x(\mathbf{r}) - x(\mathbf{r}')|^2. \quad (1.97)$$

Ce modèle permet d'avoir des zones homogènes dans l'image en imposant une variation douce entre les voisins. Une deuxième fonction pour les champs discrets est la fonction de Kronecker :

$$\varphi_l(z(\mathbf{r}) - z(\mathbf{r}')) = \delta(z(\mathbf{r}) - z(\mathbf{r}')). \quad (1.98)$$

Ce modèle est connu dans la littérature comme le modèle de Potts qui permet de modéliser des champs discrets compacts.

[Pea95] introduit une autre classe de modèles *a priori* dits non homogènes basés sur le mélange de différents modèles. Ces modèles permettent une meilleure représentation des images avec des contours bien définis grâce à une étape de classification des régions de l'image. On trouve dans [Tit86] les éléments essentiels des modèles de mélange et leur applications.

Nous détaillons, dans le chapitre 3, notre choix de modélisation *a priori* et notre modèle de mélange de champs de Gauss-Markov-Potts ainsi que son intérêt pour la reconstruction des objets composés d'un nombre fini de matériaux homogènes et compacts.

Calcul bayésien

En calcul bayésien, nous nous intéressons aux outils permettant d'obtenir une estimation des inconnues à partir de la loi *a posteriori*. Deux estimateurs sont souvent utilisés : l'estimateur au sens du maximum *a posteriori* (MAP) et l'estimateur au sens de l'espérance *a posteriori* (EAP). Le premier nécessite une méthode d'optimisation et le second nécessite une méthode d'intégration. En pratique, l'expression analytique de ces estimateurs s'obtient pour un ensemble limité d'*a priori* comme dans le cas gaussien. Néanmoins, cela est plus difficile pour les modèles de mélange à cause de la complexité introduite par la classification qui nécessite aussi une estimation.

Une première approche consiste à utiliser une méthode d'optimisation pour calculer l'estimateur MAP, comme une méthode de gradient, une méthode génétique ou le recuit simulé. D'autres méthodes cherchent à approcher la loi *a posteriori*, soit sous forme analytique soit sous forme numérique. Ensuite, cette forme approchée est utilisée pour obtenir l'estimateur. Nous nous intéressons à cette deuxième classe de méthodes et nous comparons les techniques d'approximation numérique et les techniques d'approximation analytique du point de vue de la qualité de reconstruction et de la complexité de calcul.

Dans ce qui suit, nous énumérons les méthodes principales utilisées pour le calcul bayésien :

- les méthodes itératives comme les méthodes de gradient. Elle sont rapides en ce qui concerne la mise en œuvre, mais elles peuvent conduire à des solutions locales dans le cas de critères non convexes,
- le recuit simulé proposée par [KGV83] pour trouver l'optimum global d'un critère non convexe. Il est inspiré d'un processus utilisé en métallurgie pour modifier les caractéristiques d'un métal. La probabilité d'une configuration est supposée s'écrire sous forme exponentielle :

$$p(\mathbf{x}) \propto e^{-\frac{E(\mathbf{x})}{T}}, \quad (1.99)$$

où $E(\cdot)$ est une fonction d'énergie et T détermine la température de probabilité (en analogie avec la physique statistique). L'algorithme comporte deux étapes :

1. la première étape consiste à changer la configuration actuelle de la solution. La probabilité d'acceptation de la nouvelle configuration P_a dépendra de la différence d'énergie :

$$P_a = e^{-\frac{E(\mathbf{x}_k) - E(\mathbf{x}_{k-1})}{T}}. \quad (1.100)$$

Pour des températures très élevées, la probabilité d'acceptation reste élevée même pour des configurations avec une énergie plus élevée. Ceci permet à l'algorithme de sortir des minima locaux,

2. la deuxième étape consiste à baisser la température au cours des itérations. Avec la baisse de température, la probabilité d'acceptation devient faible et le système change très peu. Ce changement de température peut être graduel avec le changement d'état ou il peut suivre plusieurs changements d'état.

La méthode souffre d'une convergence lente quand la taille des données devient très importante, notamment pour les critères plats où les méthodes de gradient convergent beaucoup plus rapidement.

- L'échantillonnage stochastique regroupe un ensemble de méthodes dont l'objectif est d'approcher une distribution de probabilité $p(\cdot)$ d'une manière numérique. L'idée est de tirer un nombre représentatif d'échantillons $\mathbf{x}_1, \mathbf{x}_2, \dots, \mathbf{x}_L$ selon la distribution p . Puis, on les utilise pour approcher les moments d'une manière empirique :

$$\hat{\mathbf{x}} = \mathbf{E}(\mathbf{x}) \approx \sum_{l=1}^L \mathbf{X}_l. \quad (1.101)$$

Il existe plusieurs variantes de cette méthode, comme l'échantillonnage d'importance, l'échantillonnage de rejet, l'échantillonnage de Métropolis-Hasting, l'échantillonnage de Gibbs et, apparu plus récemment, l'échantillonnage imbriqué (nested sampling). On discutera cette dernière méthode en détails dans le chapitre 4.

Ces méthodes présentent l'avantage d'explorer la loi *a posteriori*, ce qui permet d'éviter d'être bloqué dans un maximum local. Cependant, son application est limitée par la possibilité d'échantillonner selon la loi et par la vitesse de convergence qui devient très faible quand la dimension de la loi est grande.

- Les méthodes d'approximation analytiques : dans ces méthodes, on approche la loi *a posteriori* par une autre loi qui facilite le calcul de l'estimateur. On prend, en premier exemple, l'approximation de Laplace qui consiste à approcher la loi *a posteriori* par une loi gaussienne multivariée autour d'un maximum local. Son calcul devient plus difficile quand la dimension du problème devient importante

car il nécessite le calcul de la matrice hessienne de l'*a posteriori*. En plus, elle n'est pas adaptée pour les *a posteriori* multimodaux. Une autre exemple est l'approche bayésienne variationnelle qui consiste à approcher la loi *a posteriori* par une autre distribution de forme libre et séparable. On détaillera cette méthode dans le chapitre 5.

1.5 Contribution et plan de l'étude

Cette thèse s'est déroulée au sein du Laboratoire des Signaux et Systèmes (L2S), entre deux équipes de recherche : le Groupe Problèmes Inverses (GPI) et le Département de Recherche en Électromagnétisme (DRÉ). Le GPI s'intéresse aux méthodologies du traitement du signal et de l'inférence bayésienne pour les problèmes inverses, plus particulièrement pour la tomographie X et l'imagerie micro-onde. Le DRÉ s'intéresse plus à la modélisation directe en électromagnétisme et aux méthodes d'inversion déterministes. Plusieurs travaux ont déjà été effectués au sein du laboratoire sur la tomographie classique et l'imagerie de diffraction. Par exemple, [FSM09] traite d'une approche bayésienne utilisant l'échantillonnage stochastique pour la reconstruction en tomographie X. Les travaux de [Hen09] ont porté sur une approche déterministe de reconstruction en imagerie micro-onde pour les applications biomédicales. Les travaux de [Fér06], en collaboration entre le GPI et le DRÉ, ont porté sur une approche bayésienne pour l'imagerie micro-onde 2D en l'espace libre. Une approche basée sur l'échantillonnage stochastique a été utilisée pour le calcul bayésien. Les méthodes proposées dans cette thèse sont testées en utilisant des données simulées et des données expérimentales provenant de l'Institut Fresnel à Marseille.

Dans cette thèse, nous avons aussi choisi une approche bayésienne pour le problème inverse en imagerie de diffraction. La modélisation directe est basée sur les équations intégrales en champ électrique discrétisées à l'aide de la méthode des moments. Un modèle de mélange de Gauss-Markov avec un champ caché de Potts a été choisi comme modèle *a priori*. Pour le calcul bayésien, nous avons testé les deux approximations de la loi *a posteriori* : l'échantillonnage stochastique avec un échantillonneur de Gibbs et l'approximation analytique dite approche bayésienne variationnelle. Nous avons appliqué ces méthodes sur trois problèmes réels. Tout d'abord nous nous sommes intéressés au problème de tomographie classique en rayon X avec un modèle linéaire. Puis nous avons abordé l'imagerie de diffraction avec la tomographie optique de diffraction 2D et enfin l'imagerie micro-onde 3D.

Nous listons ici les contributions majeures apportées par cette thèse :

- l'approche bayésienne variationnelle avec un modèle *a priori* de Gauss-Markov-Potts appliquée aux problèmes inverses linéaires et non linéaires. Cette approche a été appliquée en déconvolution d'image et a été le sujet d'une publication dans la revue "IEEE Transactions on Image Processing" [A3]. Nous l'avons aussi appliquée en tomographie classique en rayon X (ceci a fait l'objet d'une publication dans MaxEnt 2008, Bayesian inference and maximum entropy methods in science and engineering)[B5]. En imagerie de diffraction, les travaux ont été soumis pour publication dans la revue "Inverse Problems in Science and Engineering" [A2],
- l'échantillonnage de Gibbs pour un modèle de Gauss-Markov-Potts appliqué en imagerie de diffraction 3D et 2D en milieux stratifiés. Son application en tomo-

graphie optique de diffraction a été publiée dans une section spéciale de la revue “Journal of Modern Optics” [A1],

- une méthode pour l’estimation de paramètres de corrélation dans les champs markoviens comme le champ de Potts avec une approche bayésienne variationnelle. Ces résultats ont été publiés dans une communication à un congrès international (Machine Learning in Signal Processing, MLSP [B8]),
- un projecteur analytique en tomographie classique 2D avec des équations explicites pour le calcul du pourcentage de pixels dans la projection.

Le reste du manuscrit est organisé comme suit : dans le chapitre 2, nous détaillons les modèles directs dans les différentes configurations étudiées dans cette thèse sous ses formes continues et discrètes. Nous proposons également les résultats de validation du modèle sur des données simulées et expérimentales. Dans le chapitre 3, nous définissons la loi *a priori* sur l’objet, la vraisemblance des données et la loi *a posteriori* résultante. Dans le chapitre 4, nous détaillons notre première approche pour le calcul basée sur l’échantillonnage stochastique. La seconde approche avec la méthode bayésienne variationnelle sera présentée dans le chapitre 5. Nous testons les approches proposées pour trois applications : la tomographie classique en rayon X, la tomographie optique de diffraction et l’imagerie micro-onde où nous utilisons des données simulées et expérimentales. Dans le chapitre 7, nous présentons la conclusion de ce travail et ses perspectives.

2

Modélisation directe

2.1 Introduction

La première étape pour étudier un problème inverse est l'écriture du modèle direct. En principe, ce modèle permet de décrire le lien entre les données mesurées et l'objet recherché. Plus précisément, il permet de calculer les valeurs du champ mesuré connaissant l'objet à imager et la configuration de mesure. Dans ce travail, nous présentons le modèle direct pour deux types d'imagerie : sans diffraction et avec diffraction.

Dans le cas de l'imagerie sans diffraction (tomographie classique), le modèle direct classiquement utilisé est la loi de Beer-Lambert qui relie l'intensité mesurée en un point de l'espace à l'intégrale de la densité de l'objet le long du trajet source-récepteur et à l'intensité de la source. Ceci donne lieu à un modèle linéaire.

Cependant en présence de diffraction, ce modèle n'est plus valable à cause des interactions à l'intérieur de l'objet. Nous avons choisi une modélisation directe basée sur les équations intégrales en champ électrique obtenues par application du théorème de Green aux équations d'onde de Helmholtz satisfaites par les champs et en tenant compte des conditions de rayonnement à l'infini et de continuité aux interfaces. Deux équations couplées décrivant le modèle direct sont alors obtenues. La première est l'équation d'observation qui relie les données au contraste et au champ total. La seconde est l'équation de couplage (d'état) qui exprime le champ total à l'intérieur de l'objet. Nous le verrons, dans le paragraphe (2.3), que le modèle direct est non linéaire.

Comme introduit dans le premier chapitre, nous avons choisi une approche d'inversion basée sur une modélisation directe discrète car ceci permet plus de flexibilité dans la résolution du problème inverse. Dans ce chapitre, nous présentons les différents modèles directs sous leur forme continue. Puis, nous décrivons la forme discrète utilisée dans ce travail. D'abord nous présentons le modèle direct d'imagerie sans diffraction ensuite nous traitons l'imagerie de diffraction dans ces différents modes : 2D-TM, 2D-TE et

3D. Nous terminons par la validation de ces modèles avec des données simulées et des données réelles.

2.2 Tomographie classique

Dans le cas de l'imagerie active sans diffraction, l'interaction entre l'objet et l'onde interrogatrice est supposée suivre un modèle de rayon. On considère que l'objet est éclairé par des rayons reliant en ligne droite chaque point du détecteur à la source. Ces rayons sont atténués par l'objet en fonction de l'épaisseur de matière traversée et de sa densité (fig.2.1). La loi de Beer-Lambert permet de représenter l'intensité du rayon sur un point du détecteur $I(\vec{r}')$ en fonction de la densité de l'objet \mathcal{X} comme suit :

$$\log \left(\frac{I(\vec{r}')}{I(\vec{r})} \right) = - \int_{\vec{r}\vec{r}'} \mathcal{X}(\vec{l}) d\vec{l}, \quad (2.1)$$

avec $I(\vec{r})$ l'intensité de la source et $\vec{r}\vec{r}'$ la droite qui relie la source au détecteur. Deux

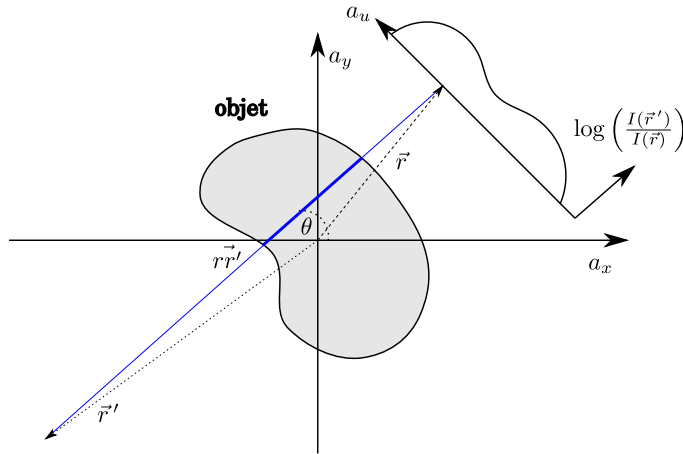


FIGURE 2.1 – Modèle d'intégrale sur une ligne droite

types de sources de rayonnement sont étudiés dans la littérature (fig.2.2) : les sources générant des ondes pouvant être considérées comme planes et les sources ponctuelles qui produisent un rayonnement en éventail (fan-beam). En pratique, le rapport $\log \left(\frac{I(\vec{r}')}{I(\vec{r})} \right)$ est remplacé par \mathcal{Y} , ce qui nous amène à un modèle direct continu linéaire. On désigne l'ensemble des projections pour les différents angles de vue sous le terme sinogramme.

Concernant la discrétisation du modèle, nous commençons par un maillage de l'objet et du capteur. Nous avons choisi un maillage rectangulaire (parallélépipédique) pour l'objet et linéaire (rectangulaire) pour le détecteur. Nous considérons que la densité de l'objet est constante dans chaque pixel (ou voxel). En conséquence, le modèle discret se transforme en un jeu d'équations linéaires où les projections (les données) \mathbf{y} sont le produit entre un vecteur représentant l'objet \mathbf{x} et une matrice système \mathbf{H} :

$$\mathbf{y} = \mathbf{H}\mathbf{x}. \quad (2.2)$$

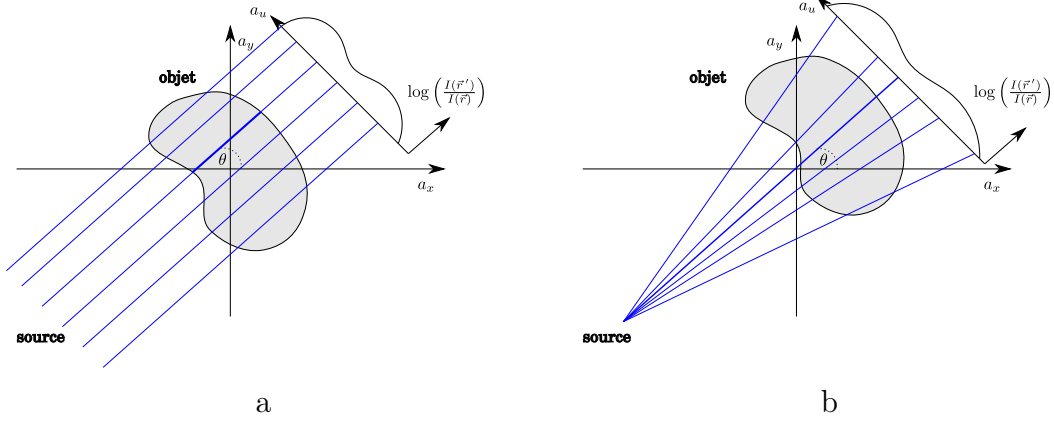


FIGURE 2.2 – a) modèle de projections parallèles , b) modèle de projections en éventail

Chaque élément de cette matrice représente la contribution de chaque pixel de l'objet au niveau d'un pixel du récepteur. Souvent cette matrice est de très grande dimension ce qui rend son stockage en mémoire impossible. Il existe d'autres approches basées sur le calcul des opérateurs évaluant l'application de cette matrice sur un vecteur donné (l'objet). On distingue deux opérateurs : un opérateur de projection $\mathcal{D}_X(\mathbf{x}) = \mathbf{H}\mathbf{x}$ et un opérateur de rétro-projection (l'opérateur adjoint) $\mathcal{T}_X(\mathbf{y}) = \mathbf{H}^t\mathbf{y}$.

Il existe dans la littérature plusieurs méthodes pour calculer ces opérateurs. Elles se différencient par leur vitesse de calcul et leur précision. On peut les classer en trois catégories :

- “pixel/voxel driven” [ZGH94] : calcule la contribution d'un voxel de l'objet en projetant son centre sur le détecteur et en interpolant sa position par rapport au centre de chaque pixel du détecteur,
- “ray driven” [Jos82] : calcul la contribution d'un voxel de l'objet en lançant un rayon du centre de chaque pixel du détecteur et en calculant la distance avec le centre du voxel de l'objet,
- “distance driven” [MB04] : projette les limites des voxels de l'objet et les pixels du détecteur sur un axe commun. Ensuite, la distance de chevauchement est utilisée pour calculer la contribution du voxel.

Ces méthodes sont détaillées et comparées dans [MB04, XM06]. En outre dans l'approche de matrice système, on trouve des méthodes de calcul analytiques de la contribution qui sont plus précises mais qui prennent souvent un temps de calcul important. Dans ce qui suit, nous présentons une de nos contributions : une méthode de projection analytique 2D avec des équations explicites qui permettent une mise en œuvre rapide.

Dans une approche analytique de projection, on définit les données $y(\mathbf{r})$ comme l'intégrale de l'intensité de tous les rayons qui interceptent la surface du détecteur \mathbf{r}' :

$$y(\mathbf{r}') = \int_{r'_d r'_f} \mathcal{Y}(\mathbf{l}) d\mathbf{l}. \quad (2.3)$$

La contribution $h(\mathbf{r}', \mathbf{r})$ d'un pixel de l'objet \mathbf{r} sur un pixel du capteur \mathbf{r}' est donc obtenue par le calcul de l'aire de la surface d'intersection entre le pixel \mathbf{r} et le faisceau déterminé par le capteur \mathbf{r}' (Fig.2.3). Pour cela, on a besoin des coordonnées d'un coin de chaque pixel de l'objet. On choisit le coin inférieur gauche $V_{Pd} = (V_{Pd}^x)$

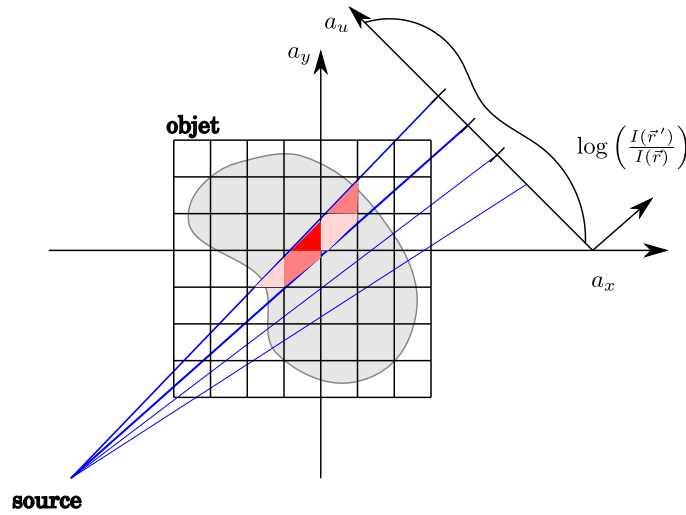


FIGURE 2.3 – Principe du projecteur analytique. Les éléments de la matrice de projection sont les aires des surfaces colorées

avec les dimensions de pixel (d_{px}, d_{py}). De plus, il faut calculer les points d'intersection entre les deux rayons limitant le détecteur et les bords du pixel ($\{V_{I_{l1}}^y, V_{I_{r1}}^y, V_{I_{d1}}^x, V_{I_{u1}}^x\}$ et $\{V_{I_{l2}}^y, V_{I_{r2}}^y, V_{I_{d2}}^x, V_{I_{u2}}^x\}$). Le calcul de l'aire d'intersection (cf. fig.2.4) se réduit au calcul de l'aire du rectangle qui enveloppe les rayons dans le pixel (R_{env}) moins l'aire des deux triangles formés par les rayons (T_{r1}, T_{r2}) (cela est valable dans le cas général, mais dans certains cas l'aire des triangles peut-être égale à zéro).

$$h = \mathcal{A}_R - \mathcal{A}_{T_1} - \mathcal{A}_{T_2}. \quad (2.4)$$

Nous commençons par la distance entre les points d'intersection et le coin du pixel avec une limitation sur la dimension du pixel (les dimensions négatives sont bornées par zéro et les dimensions positives sont bornées par la dimension du pixel). Définissons la fonction $\mathcal{L}_{[a,b]}$ comme :

$$\mathcal{L}_{[a,b]}(x) = \begin{cases} a & \text{si } x < a \\ b & \text{si } x > b \\ x & \text{si } x \in [a, b] \end{cases}. \quad (2.5)$$

Pour chaque rayon $i = 1, 2$, nous calculons quatre distances $\{d_{r_i}^{x1}, d_{r_i}^{x2}, d_{r_i}^{y1}, d_{r_i}^{y2}\}$ définies comme :

$$d_{r_i}^{x1} = \mathcal{L}_{[0, d_{px}]}(V_{I_{di}}^x - V_{P_{dl}}^x), \quad (2.6)$$

$$d_{r_i}^{x2} = \mathcal{L}_{[0, d_{px}]}(V_{I_{ui}}^x - V_{P_{dl}}^x), \quad (2.7)$$

$$d_{r_i}^{y1} = \mathcal{L}_{[0, d_{py}]}(V_{I_{li}}^y - V_{P_{dl}}^y), \quad (2.8)$$

$$d_{r_i}^{y2} = \mathcal{L}_{[0, d_{py}]}(V_{I_{ri}}^y - V_{P_{dl}}^y). \quad (2.9)$$

À partir de ces distances, nous pouvons déduire l'aire du rectangle \mathcal{A}_R et les triangles

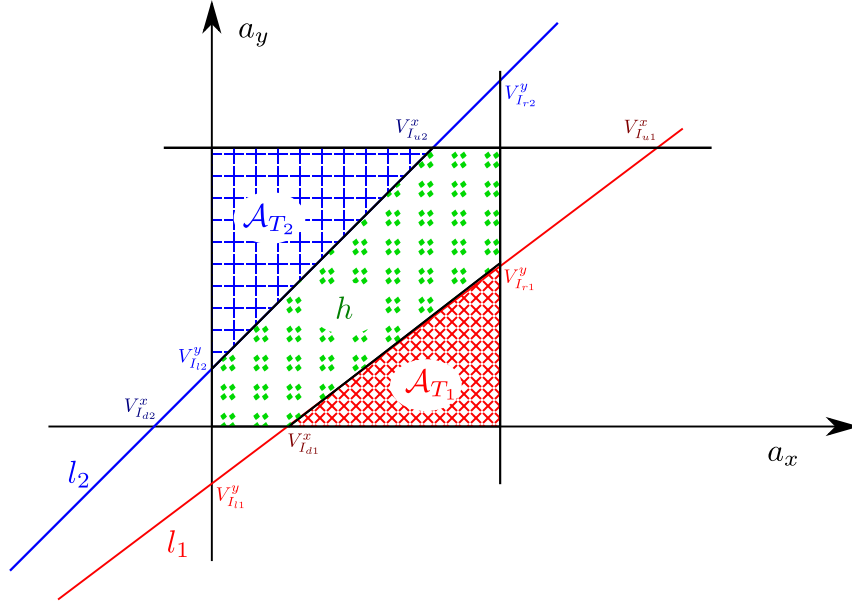


FIGURE 2.4 – Les éléments de calcul de l'aire d'intersection entre deux rayons et une cellule élémentaire

$\mathcal{A}_{T_1}, \mathcal{A}_{T_2}$:

$$\mathcal{A}_R = \left(\max(d_{r_1}^{x_1}, d_{r_2}^{x_1}, d_{r_1}^{x_2}, d_{r_2}^{x_2}) - \min(d_{r_1}^{x_1}, d_{r_2}^{x_1}, d_{r_1}^{x_2}, d_{r_2}^{x_2}) \right) \times \left(\max(d_{r_1}^{y_1}, d_{r_2}^{y_1}, d_{r_1}^{y_2}, d_{r_2}^{y_2}) - \min(d_{r_1}^{y_1}, d_{r_2}^{y_1}, d_{r_1}^{y_2}, d_{r_2}^{y_2}) \right), \quad (2.10)$$

$$\mathcal{A}_{T_1} = \frac{1}{2} |d_{r_1}^{x_1} - d_{r_1}^{x_2}| \times |d_{r_1}^{y_1} - d_{r_1}^{y_2}|, \quad (2.11)$$

$$\mathcal{A}_{T_2} = \frac{1}{2} |d_{r_2}^{x_1} - d_{r_2}^{x_2}| \times |d_{r_2}^{y_1} - d_{r_2}^{y_2}|. \quad (2.12)$$

Dans le cas 3D, il existe des travaux [SBH06] portant sur le calcul analytique du projecteur mais d'une manière implicite.

2.3 Imagerie de diffraction

Dans le cas de l'imagerie de diffraction, les dimensions de l'objet deviennent proches de la longueur d'onde incidente et le mode de résonance devient dominant. Le modèle présenté dans la section précédente n'est plus valable. Il nous faut une représentation plus fine basée sur les équations de Maxwell. Nous avons choisi dans ce travail une modélisation basée sur les équations intégrales en champ électrique. Nous les obtenons en appliquant le théorème de Green aux équations d'onde de Helmholtz et en prenant en compte les conditions de continuité et de rayonnement [Che95, CK98]. Dans l'équation qui relie le champ diffracté dans le domaine de mesure \mathcal{S} et le contraste de l'objet (dite l'équation d'observation), interviennent la fonction de Green d'observation et également

le champ total dans le domaine \mathcal{D} contenant l'objet inconnu. Pour cette raison, nous utilisons une deuxième équation (dite équation de couplage) qui décrit le champ total en fonction du champ incident, de la fonction de Green de couplage et du contraste de l'objet. Dans les équations, nous avons besoin d'écrire les expressions analytiques des fonctions de Green qui dépendent du milieu étudié et de la configuration de mesure.

Dans ce qui suit, nous décrivons les fonctions de Green pour les milieux étudiés dans notre travail. Ensuite, nous présentons les modèles directs dans les différents cas de diffraction dans leurs formes continue et discrète. La discrétisation est effectuée avec la méthode des moments (MoM) [Gib08] avec des fonctions de base rectangulaires et des impulsions de Dirac comme fonctions tests. On termine en montrant la non linéarité du modèle direct.

2.3.1 Fonctions de Green

L'expression de la fonction de Green dépend du milieu et de la configuration de mesure. Nous énonçons, dans cette section, les expressions de la fonction de Green dans l'espace libre dans des configurations 2D et 3D pour des applications en imagerie micro-onde. Ensuite, nous proposons ces expressions dans le cas d'un milieu stratifié 2D avec une observation en champ lointain pour les applications en tomographie optique de diffraction.

Espace libre

La fonction de Green est la solution élémentaire de l'équation d'onde scalaire de Helmholtz dans le cas 2D et 3D [Gib08]. Avec une convention temporelle en $e^{-i\omega t}$, on obtient dans le cas 2D l'expression suivante :

$$G(\vec{r}, \vec{r}') = -\frac{i}{4} H_0^{(1)}(k|\vec{r} - \vec{r}'|), \quad (2.13)$$

où $k = \frac{2\pi}{\lambda}$ est la constante de propagation, λ la longueur d'onde et $H_0^{(1)}(.)$ est la fonction de Hankel de première espèce et d'ordre zéro.

Dans le cas 3D, on peut trouver une expression analytique explicite de la fonction de Green. Elle s'écrit sous la forme :

$$G(\vec{r}, \vec{r}') = \frac{e^{+ik|\vec{r} - \vec{r}'|}}{4\pi|\vec{r} - \vec{r}'|}. \quad (2.14)$$

Notons que cette fonction garde la même forme pour l'équation d'observation et l'équation de couplage.

Milieu Stratifié

Dans ce travail, nous traitons le cas d'un milieu stratifié (fig. 2.5). L'espace est composé de deux milieux semi-infinis, \mathcal{D}_1 et \mathcal{D}_2 , avec deux constantes de propagation, k_1 et k_2 . L'interface entre les deux milieux γ_{12} est parallèle à l'axe a_x . On considère

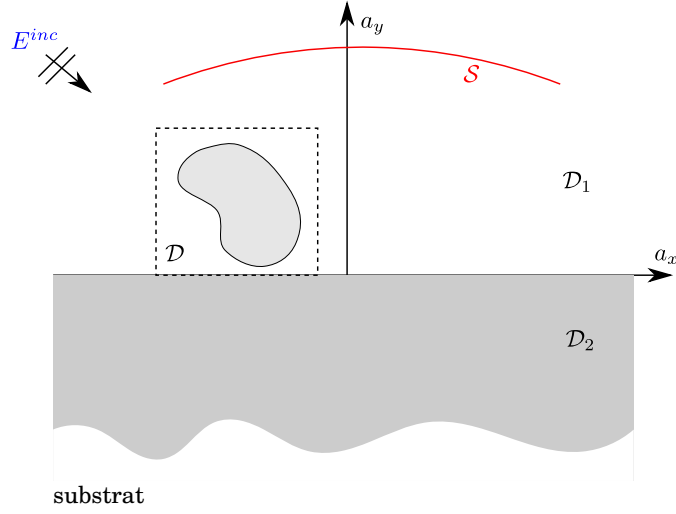


FIGURE 2.5 – L'exemple du milieu stratifié traité dans ce travail

que l'objet est confiné dans le domaine $\mathcal{D} \subset \mathcal{D}_1$. La source et les points de mesure sont également localisés dans le domaine \mathcal{D}_1 .

Contrairement au cas de l'espace libre, la fonction de Green en milieu stratifié est définie dans le domaine de Fourier associé à l'axe a_x [SDLK96, LD91b].

$$G(\vec{r}, \vec{r}') = \frac{1}{2\pi} \int_{-\infty}^{\infty} g(a_y, a'_y, \alpha) \exp(i\alpha(a_x - a'_x)) d\alpha. \quad (2.15)$$

La fonction $g(a_y, a'_y, \alpha)$ est obtenue en décomposant l'onde émise par la source en un spectre d'ondes planes avec différents angles d'incidence qui sont réfléchies ou transmises à l'interface. Ensuite, toutes les contributions sont ajoutées au point d'observation. Dans le cas où la source \vec{r}' et l'observation \vec{r} sont dans le domaine \mathcal{D}_1 , on trouve,

$$g(a_y, a'_y, \alpha) = \frac{i}{2\beta_1} \left[\exp(i\beta_1|a_y - a'_y|) + \frac{\beta_1 - \beta_2}{\beta_1 + \beta_2} \exp(i\beta_1(a_y + a'_y)) \right], \quad (2.16)$$

$$\beta_m = \sqrt{k_m^2 - \alpha^2}, \quad \Im m(\beta_m) \geq 0, \quad m = 1, 2.$$

Cette dernière expression est composée de la somme de deux termes : le premier terme G^s (dit singulier) correspond au développement spectral de la fonction de Green dans l'espace libre (eq. 2.13) et le second terme G^r (dit régulier) correspond aux réflexions sur l'interface γ_{12} .

Comme on utilise un modèle d'observation en champ lointain à une distance fixe de l'objet, la fonction de Green d'observation peut-être approchée en utilisant la méthode de la phase stationnaire [Cle96] :

$$G^o(\theta, \vec{r}') = i \left[\exp(-i\beta_1(\theta)a'_y) + R(\theta) \exp(i\beta_1(\theta)a'_y) \right] \frac{\exp(-i(\alpha(\theta)a'_x + \frac{\pi}{4}))}{\sqrt{8\pi k_1}}, \quad (2.17)$$

$$\alpha(\theta) = k_1 \sin(\theta), \beta_m(\theta) = \sqrt{k_m^2 - \alpha(\theta)^2} \quad \text{pour } m = 1, 2$$

$$R(\theta) = \frac{\beta_1(\theta) - \beta_2(\theta)}{\beta_1(\theta) + \beta_2(\theta)}.$$

Dans ce qui suit, nous décrivons les différents modèles directs en utilisant les fonctions définies ci-dessus.

2.3.2 Cas 2D-TM

Dans un mode d'imagerie 2D en polarisation transverse magnétique (TM), le champ incident $\vec{E}^{inc} = E^{inc}\vec{a}_z$ est perpendiculaire au plan de la figure 2.6. Le champ diffracté sera donc aussi perpendiculaire à ce plan (sous l'hypothèse que l'objet est non dépolarisant). Cela conduit à un modèle scalaire :

$$E^{dif}(\vec{r}') = \int \int_{\mathcal{D}} G^o(\vec{r}, \vec{r}') X(\vec{r}) E(\vec{r}) d\vec{r}, \quad \forall \vec{r}' \in \mathcal{S} \text{ (observation)}, \quad (2.18)$$

$$E(\vec{r}') = E^o(\vec{r}') + \int \int_{\mathcal{D}} G^c(\vec{r}, \vec{r}') X(\vec{r}) E(\vec{r}) d\vec{r}, \quad \forall \vec{r}' \in \mathcal{D} \text{ (couplage)}, \quad (2.19)$$

avec E^o le champ total à l'absence de l'objet, E est le champ total en sa présence, $X = k^2(\vec{r}) - k_0^2$ le contraste de l'objet et E^{dif} le champ diffracté.

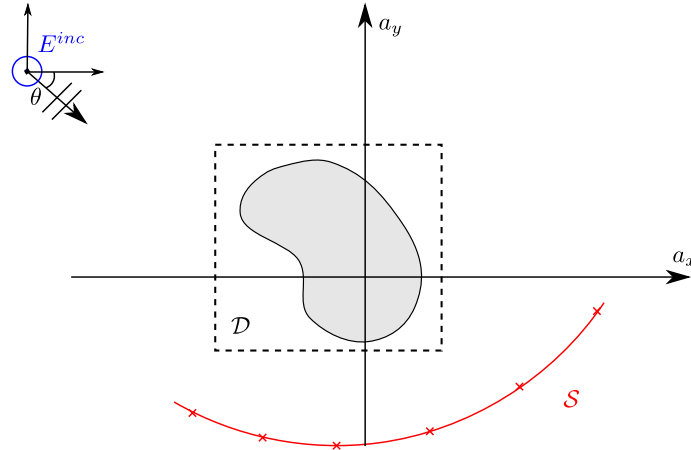


FIGURE 2.6 – La configuration en polarisation transverse magnétique (TM)

Pour calculer le modèle discret, on applique la méthode des moments avec des fonctions de base rectangulaires (en fait les fonctions caractéristiques des pixels) et des fonctions tests de Dirac. Il en résulte un modèle discret composé de deux jeux d'équations algébriques :

$$\mathbf{y} = \mathbf{E}^{dif} = \mathbf{G}^o \mathbf{X} \mathbf{E}, \quad (2.20)$$

$$\mathbf{E} = \mathbf{E}^o + \mathbf{G}^c \mathbf{X} \mathbf{E}, \quad (2.21)$$

où \mathbf{G}^o et \mathbf{G}^c sont des matrices de très grandes dimensions ($N \times N$ où N est le nombre de pixels discrétisant l'objet) dont les éléments sont obtenus en intégrant G^o et G^c sur un pixel élémentaire. Notons qu'en général quelque soit le cas de polarisation, la convergence des calculs de champ est obtenue pour des pixels de côté Δ tel que $\Delta \leq \frac{\lambda}{10}$, où λ est la longueur d'onde. On distingue deux cas : l'espace libre et le milieu stratifié.

Espace libre

Ici nous remplaçons l'intégrale sur chaque pixel par l'intégrale sur un disque de même aire. Cette approximation permet de nous affranchir de la singularité de la fonction de Green au niveau du point source et d'obtenir une expression analytique de l'intégrale. On obtient ainsi :

$$g^c(\mathbf{r}, \mathbf{r}') = \frac{1}{k_0^2} \begin{cases} \frac{i\pi k_0 \varrho_\Delta}{2} H_1^{(1)} - 1 & \text{si } \mathbf{r} = \mathbf{r}', \\ \frac{i\pi k_0 \varrho_\Delta}{2} H_0^{(1)}(k_0 |\mathbf{r} - \mathbf{r}'|) J_1(k_0 \varrho_\Delta) & \text{si } \mathbf{r} \neq \mathbf{r}', \end{cases} \quad (2.22)$$

avec $\varrho_\Delta = \frac{\Delta}{\sqrt{\pi}}$. De la même manière, on écrit la fonction de Green d'observation :

$$g^o(\mathbf{r}, \mathbf{r}') = \frac{i\pi \varrho_\Delta}{2k_0} H_0^{(1)}(k_0 |\mathbf{r} - \mathbf{r}'|) J_1(k_0 \varrho_\Delta). \quad (2.23)$$

On précise que dans le cas de l'espace libre, le champ total en absence d'objet \mathbf{E}^o est le même que le champ incident $\mathbf{E}^o = \mathbf{E}^{inc}$.

Milieu Stratifié

Dans le cas d'un milieu stratifié, on trouve un terme en plus par rapport au cas de l'espace libre à cause des réflexions sur l'interface γ_{12} entre les deux milieux. La matrice de couplage s'écrit donc sous la forme d'une somme de deux matrices, l'une singulière notée \mathbf{G}^{cs} et l'autre régulière notée \mathbf{G}^{cr} . Pour la partie singulière, on utilise la même technique que dans le cas de l'espace libre et on trouve :

$$g^{cs}(\mathbf{r}, \mathbf{r}') = \frac{1}{k_1^2} \begin{cases} \frac{i\pi k_1 \varrho_\Delta}{2} H_1^{(1)}(k_1 \varrho_\Delta) - 1 & \text{si } \mathbf{r} = \mathbf{r}', \\ \frac{i\pi k_1 \varrho_\Delta}{2} H_0^{(1)}(k_1 |\mathbf{r} - \mathbf{r}'|) J_1(k_1 \varrho_\Delta) & \text{si } \mathbf{r} \neq \mathbf{r}'. \end{cases} \quad (2.24)$$

Cependant, les éléments de la matrice régulière ne sont pas disponibles d'une manière explicite dans le domaine spatial. Ils s'expriment dans le domaine spectral associé à a_x :

$$\check{g}^{cr}(a_y, a'_y, \alpha_x) = \frac{2i \sin\left(\frac{\Delta \alpha_x}{2}\right) \sin\left(\frac{\Delta \beta_1}{2}\right)}{\alpha_x \beta_1^2} \frac{\beta_1 - \beta_2}{\beta_1 + \beta_2} \exp(i\beta_1(a_y + a'_y)), \quad (2.25)$$

$$g^{cr}(\mathbf{r}, \mathbf{r}') = \int_{-\infty}^{\infty} \check{g}^{cr}(a_y, a'_y, \alpha_x) \exp(i\alpha_x(a_x - a'_x)) d\alpha_x. \quad (2.26)$$

En pratique, les éléments sont calculés grâce à une transformée de Fourier inverse avec un pas d'échantillonnage très fin. On peut aussi utiliser son expression directement dans le domaine spectral si la transformée de Fourier est utilisée pour calculer le produit matrice vecteur $\mathbf{G}^o \mathbf{w}$ (comme on le verra dans D.5). Si le milieu \mathcal{D}_1 est sans pertes, lors de la discrétisation de \check{g}^{cr} , il faut éviter la singularité rencontrée pour $\beta_1 = 0$, soit pour $\alpha = k_1$. Pour ce faire, un pas d'échantillonnage particulier pour les pixels Δ doit être choisi : le rapport longueur d'onde λ sur pas d'échantillonnage ne doit pas être un entier.

Concernant la matrice d'observation, nous obtenons une expression qui dépend de l'angle d'observation θ car nous travaillons en champ lointain à une distance constante :

$$g^o(\theta, \mathbf{r}) = i \sqrt{\frac{2}{\pi k_1}} \frac{\sin\left(\frac{\beta_1(\theta)\Delta}{2}\right) \sin\left(\frac{\alpha(\theta)\Delta}{2}\right)}{\alpha(\theta)\beta_1(\theta)} \exp\left(i\left[\alpha(\theta)a_x - \frac{\pi}{4}\right]\right) \times [\exp(-\beta_1(\theta)a_y) + R(\theta) \exp(i\beta_1(\theta)a_y)]. \quad (2.27)$$

où $\alpha(\theta) = k_1 \sin(\theta)$, $\beta_m(\theta) = \sqrt{k_m^2 - \alpha^2(\theta)}$ pour $m = 1, 2$.

Afin d'unifier les notations, nous utilisons toujours $g^o(\mathbf{r}', \mathbf{r})$ pour indiquer les éléments de la matrice d'observation en prenant en compte le fait que $\mathbf{r}' = \theta$ dans le cas d'une observation en champ lointain.

Contrairement au cas de l'espace libre, le champ total en absence d'objet E^o n'est plus le champ incident à cause de la réflexion sur l'interface air-substrat. On l'écrit sous la forme :

$$E^o = e^{-ik_1(a_x \cos(\theta_{inc}) + a_y \sin(\theta_{inc}))} + R(\theta_{inc})e^{ik_1(a_x \cos(\theta_{inc}) - a_y \sin(\theta_{inc}))}. \quad (2.28)$$

2.3.3 Cas 2D-TE

Dans une approche d'imagerie de diffraction en mode transverse électrique (TE), le vecteur de champ incident est contenu dans l'espace de l'objet (\vec{a}_x, \vec{a}_y) , $\vec{E}^{inc} = E^{inc, P_x} \vec{a}_x + E^{inc, P_y} \vec{a}_y$. Nous sommes ici dans le cas d'un modèle vectoriel (fig. 2.7) :

$$\vec{E}^{dif}(\vec{r}) = \iint_{\mathcal{D}} G^o(\vec{r}, \vec{r}') X(\vec{r}') \vec{E}(\vec{r}') d\vec{r}' + \frac{\vec{\nabla} \cdot \vec{\nabla}}{k_0^2} \iint_{\mathcal{D}} G^o(\vec{r}, \vec{r}') X(\vec{r}') \vec{E}(\vec{r}') d\vec{r}' \quad (2.29)$$

$$\begin{aligned} \vec{E}(\vec{r}) = \vec{E}^o + \iint_{\mathcal{D}} G^c(\vec{r}, \vec{r}') X(\vec{r}') \vec{E}(\vec{r}') d\vec{r}' \\ + \frac{\vec{\nabla} \cdot \vec{\nabla}}{k_0^2} \iint_{\mathcal{D}} G^c(\vec{r}, \vec{r}') X(\vec{r}') \vec{E}(\vec{r}') d\vec{r}' \end{aligned} \quad (2.30)$$

où $\vec{\nabla}$ est l'opérateur de dérivation $\vec{\nabla} = \begin{cases} \frac{\partial}{\partial a_x} \\ \frac{\partial}{\partial a_y} \end{cases}$

Comme l'opérateur $\vec{\nabla} \cdot \vec{\nabla}$ agit sur un produit de convolution, plusieurs choix existent pour son application sur G^c et $X \vec{E}$. Notons principalement que :

1. les deux opérateurs portent sur la fonction de Green G^c . Cela revient alors à définir une fonction de Green dyadique (cf. [Che95]).
2. L'un porte sur G^c et l'autre agit sur $X \vec{E}$.

Les différentes possibilités sont comparées dans [JP90]. Nous avons choisi la première approche comme dans [Ric66]. Le problème avec cette approche est que la fonction de Green présente une singularité non intégrable en zéro [Bla61]. Pour cela nous utilisons l'intégrale au sens de la valeur principale de Cauchy : $\mathcal{PV} \int_{\Omega} = \lim_{V \rightarrow 0} \int_{\Omega - V}$. L'équation de couplage s'écrit alors :

$$\begin{aligned} \vec{E}(\vec{r}) = \vec{E}^o + \iint_{\mathcal{D}} G^c(\vec{r}, \vec{r}') X(\vec{r}') \vec{E}(\vec{r}') d\vec{r}' \\ + \mathcal{PV} \iint_{\mathcal{D}} \frac{\vec{\nabla} \cdot \vec{\nabla} G^c(\vec{r}, \vec{r}')}{k_0^2} X(\vec{r}') \vec{E}(\vec{r}') d\vec{r}' - \frac{X(\vec{r}) \vec{E}^{\vec{r}}}{2k_0^2}, \quad \vec{r} \in \mathcal{D}. \end{aligned} \quad (2.31)$$

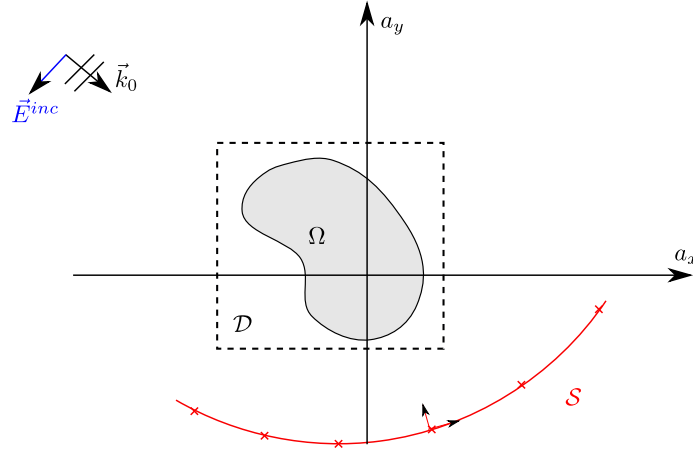


FIGURE 2.7 – La configuration d'imagerie en polarisation transverse électrique (TE)

L'application de la méthode des moments dans l'espace libre donne lieu à deux équations discrètes avec une corrélation entre les polarisations a_x et a_y :

$$\mathbf{E}^{dif} = \begin{bmatrix} \mathbf{E}^{dif,a_x} \\ \mathbf{E}^{dif,a_y} \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} \mathbf{G}^o(a_x, a_x) & \mathbf{G}^o(a_x, a_y) \\ \mathbf{G}^o(a_y, a_x) & \mathbf{G}^o(a_y, a_y) \end{bmatrix} \begin{bmatrix} \mathbf{X}\mathbf{E}^{a_x} \\ \mathbf{X}\mathbf{E}^{a_y} \end{bmatrix}, \quad (2.32)$$

$$\mathbf{E} = \begin{bmatrix} \mathbf{E}^{a_x} \\ \mathbf{E}^{a_y} \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} \mathbf{E}^{inc,a_x} \\ \mathbf{E}^{inc,a_y} \end{bmatrix} + \begin{bmatrix} \mathbf{G}^c(a_x, a_x) & \mathbf{G}^c(a_x, a_y) \\ \mathbf{G}^c(a_y, a_x) & \mathbf{G}^c(a_y, a_y) \end{bmatrix} \begin{bmatrix} \mathbf{X}\mathbf{E}^{a_x} \\ \mathbf{X}\mathbf{E}^{a_y} \end{bmatrix}, \quad (2.33)$$

où

$$\mathbf{G}^{c(a_x, a_x)}(\mathbf{r}, \mathbf{r}') = \frac{1}{k_0^2} \begin{cases} \frac{jk_0 \varrho \Delta}{4} H_1^{(1)}(k_0 \varrho \Delta) + 1 & \text{si } \mathbf{r} = \mathbf{r}' \\ \frac{j\pi \varrho \Delta J_1(k_0 \varrho \Delta)}{2\varrho^3} \left[k_0 \varrho (a_y - a'_y)^2 H_0^{(1)}(k_0 \varrho) \right. \\ \quad \left. + ((a_x - a'_x)^2 - (a_y - a'_y)^2) H_1^{(1)}(k_0 \varrho) \right] & \text{si } \mathbf{r} \neq \mathbf{r}' \end{cases} \quad (2.34)$$

$$\mathbf{G}^{c(a_y, a_y)}(\mathbf{r}, \mathbf{r}') = \frac{1}{k_0^2} \begin{cases} \frac{jk_0 \varrho \Delta}{4} H_1^{(1)}(k_0 \varrho \Delta) + 1 & \text{si } \mathbf{r} = \mathbf{r}' \\ \frac{j\pi \varrho \Delta J_1(k_0 \varrho \Delta)}{2\varrho^3} \left[k_0 \varrho (a_x - a'_x)^2 H_0^{(1)}(k_0 \varrho) \right. \\ \quad \left. + ((a_y - a'_y)^2 - (a_x - a'_x)^2) H_1^{(1)}(k_0 \varrho) \right] & \text{si } \mathbf{r} \neq \mathbf{r}' \end{cases} \quad (2.35)$$

$$\mathbf{G}^{c(a_x, a_y)}(\mathbf{r}, \mathbf{r}') = \mathbf{G}^{c(a_y, a_x)}(\mathbf{r}, \mathbf{r}') = \frac{1}{k_0^2} \begin{cases} 0 & \text{si } \mathbf{r} = \mathbf{r}' \\ \frac{j\pi \varrho \Delta J_1(k_0 \varrho \Delta)(a_x - a'_x)(a_y - a'_y)}{2\varrho^3} \times \\ \quad \left[2H_1^{(1)}(k_0 \varrho) - k_0 \varrho H_0^{(1)}(k_0 \varrho) \right] & \text{si } \mathbf{r} \neq \mathbf{r}' \end{cases} \quad (2.36)$$

avec $\varrho = |\mathbf{r} - \mathbf{r}'|$.

Le choix des fonctions de base rectangulaires n'assure pas la continuité de la densité de flux électrique aux interfaces entre les pixels, ce qui provoque l'apparition de charges fictives sur ces dernières. Néanmoins avec un pas d'échantillonnage suffisamment fin, on peut obtenir une performance acceptable. Une autre solution est, tout en gardant

les fonctions de base rectangulaires, d'appliquer un des opérateurs $\vec{\nabla}$ sur la fonction de Green et l'autre sur les courants et d'écrire les dérivations au sens des distributions. Ceci fait apparaître des termes sur les contours des pixels qui forcent la continuité de la densité de flux électrique mais qui sont très lourds à manipuler (cf. [FDMD07]).

2.3.4 Cas 3D

Nous détaillons dans cette partie la modélisation directe dans le cas de l'imagerie de diffraction 3D dans l'espace libre. Nous commençons par les deux équations continues de couplage et d'observation :

$$\begin{aligned} \vec{E}^{dif}(\vec{r}) = & \iiint_{\mathcal{D}} G^o(\vec{r}, \vec{r}') X(\vec{r}') \vec{E}(\vec{r}') d\vec{r}' \\ & + \frac{\vec{\nabla} \vec{\nabla} \cdot}{k_0^2} \iiint_{\mathcal{D}} G^o(\vec{r}, \vec{r}') X(\vec{r}') \vec{E}(\vec{r}') d\vec{r}', \forall \vec{r} \in \mathcal{O}, \end{aligned} \quad (2.37)$$

$$\begin{aligned} \vec{E}(\vec{r}) = & \vec{E}^o(\vec{r}) + \iiint_{\mathcal{D}} G^c(\vec{r}, \vec{r}') X(\vec{r}') \vec{E}(\vec{r}') d\vec{r}' \\ & + \frac{\vec{\nabla} \vec{\nabla} \cdot}{k_0^2} \iiint_{\mathcal{D}} G^c(\vec{r}, \vec{r}') X(\vec{r}') \vec{E}(\vec{r}') d\vec{r}', \forall \vec{r} \in \mathcal{D}. \end{aligned} \quad (2.38)$$

où $\vec{\nabla}$ est l'opérateur de dérivation $\vec{\nabla} = \begin{Bmatrix} \frac{\partial}{\partial a_x} \\ \frac{\partial}{\partial a_y} \\ \frac{\partial}{\partial a_z} \end{Bmatrix}$.

Ensuite, nous détaillons la discrétisation et les expressions des matrices de Green correspondantes.

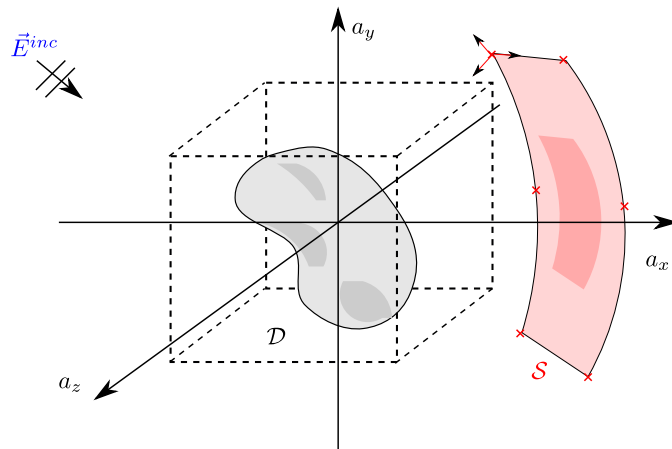


FIGURE 2.8 – La configuration de l'imagerie 3D

Comme dans le cas de l'imagerie 2D-TE, il existe plusieurs choix pour l'application des opérateurs de dérivation $\vec{\nabla}\vec{\nabla}$ sur les éléments du produit de convolution. Nous avons aussi choisi l'application des deux opérateurs sur la fonction de Green, en traitant la singularité non intégrable de la même manière. Nous continuons le développement du modèle avec l'équation de couplage sachant que la même justification s'applique sur l'équation d'observation :

$$\begin{aligned} \vec{E}(\vec{r}) = \vec{E}^o(\vec{r}) + \iiint_{\mathcal{D}} G^c(\vec{r}, \vec{r}') X(\vec{r}') \vec{E}(\vec{r}') d\vec{r}' \\ + \mathcal{PV} \iiint_{\mathcal{D}} \frac{\vec{\nabla}\vec{\nabla} G^c(\vec{r}, \vec{r}')}{k_0^2} X(\vec{r}') \vec{E}(\vec{r}') d\vec{r}' - \frac{X(\vec{r}) \vec{E}(\vec{r})}{3k_0^2}, \forall \vec{r} \in \mathcal{D}. \end{aligned} \quad (2.39)$$

En appliquant la méthode des moments avec des fonctions de base rectangulaires et des fonctions tests de Dirac, nous obtenons :

$$\mathbf{E} = \begin{bmatrix} \mathbf{E}^{a_x} \\ \mathbf{E}^{a_y} \\ \mathbf{E}^{a_z} \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} \mathbf{E}^{inc, a_x} \\ \mathbf{E}^{inc, a_y} \\ \mathbf{E}^{inc, a_z} \end{bmatrix} + \begin{bmatrix} \mathbf{G}^{c(a_x, a_x)} & \mathbf{G}^{c(a_x, a_y)} & \mathbf{G}^{c(a_x, a_z)} \\ \mathbf{G}^{c(a_y, a_x)} & \mathbf{G}^{c(a_y, a_y)} & \mathbf{G}^{c(a_y, a_z)} \\ \mathbf{G}^{c(a_z, a_x)} & \mathbf{G}^{c(a_z, a_y)} & \mathbf{G}^{c(a_z, a_z)} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} \mathbf{X}\mathbf{E}^{a_x} \\ \mathbf{X}\mathbf{E}^{a_y} \\ \mathbf{X}\mathbf{E}^{a_z} \end{bmatrix} \quad (2.40)$$

où les éléments des matrices $\mathbf{G}^{c(a_i, a_j)}$, $a_i, a_j = a_x, a_y, a_z$ sont calculés comme suit :

$$\begin{aligned} \mathbf{G}^{c(a_i, a_j)}(\mathbf{r}, \mathbf{r}') = -\frac{1}{3}\delta(a_i - a_j)\delta(\mathbf{r} - \mathbf{r}') \\ + \iiint_{\Omega_{\mathbf{r}'}} \left(k_0^2 \delta(a_i - a_j) + \frac{\partial^2}{\partial a_i \partial a_j} \right) G^c(\mathbf{r}, \vec{r}') d\vec{r}', \end{aligned} \quad (2.41)$$

où $\Omega_{\mathbf{r}'}$ est le volume correspondant au voxel. Pour obtenir l'expression analytique de chaque élément, nous remplaçons l'intégrale sur un voxel cubique par l'intégrale sur une sphère de même volume (i.e. le rayon est $\varrho_\Delta = \sqrt[3]{\frac{3}{4\pi}}\Delta$) en utilisant le développement en harmoniques sphériques [MF53] :

$$\begin{aligned} G^c(\vec{r}, \vec{r}') = \frac{ik_0}{4\pi} \sum_{n=0}^{+\infty} (2n+1) \sum_{m=0}^n \left[\varepsilon_m \frac{(n-m)!}{(n+m)!} \cos(m(\phi - \phi')) \right. \\ \left. \times \mathcal{P}_n^m(\cos(\theta)) \mathcal{P}_n^m(\cos(\theta')) \mathcal{I}_n(r, r') \right], \end{aligned} \quad (2.42)$$

où $\vec{r} = (r, \phi, \theta)$, \mathcal{P}_n^m est la fonction de Legendre associée, ε_m est le facteur de Neumann :

$$\varepsilon_m = \begin{cases} 1 & \text{si } m = 0 \\ 2 & \text{si } m \neq 0 \end{cases} \quad (2.43)$$

et $\mathcal{I}_n(r, r')$ est donné par :

$$\mathcal{I}_n(r, r') = \begin{cases} j_n(k_0 r) h_n^{(1)}(k_0 r') & \text{si } r \leq r' \\ j_n(k_0 r') h_n^{(1)}(k_0 r) & \text{si } r > r', \end{cases} \quad (2.44)$$

où j_n et $h_n^{(1)}$ la fonction de Bessel et la fonction de Hankel de première espèce sphériques.

$$j_n(k_0 r) = \sqrt{\frac{\pi}{2k_0 r}} J_{n+\frac{1}{2}}(k_0 r), \quad h_n^{(1)} = \sqrt{\frac{\pi}{2k_0 r}} H_{n+\frac{1}{2}}^{(1)}(k_0 r), \quad (2.45)$$

avec $J_{n+\frac{1}{2}}$ et $H_{n+\frac{1}{2}}^{(1)}$ les fonctions de Bessel et Hankel d'ordre $n + \frac{1}{2}$. L'intégrale de la fonction de Green sur un voxel sphérique est donnée par :

$$g^0(\mathbf{r}, \mathbf{r}') = \iiint_{0,0,0}^{\varrho_\Delta, \pi, 2\pi} G^c(\mathbf{r}, \mathbf{r}') r'^2 \sin(\theta) dr' d\theta d\phi \quad (2.46)$$

$$= \begin{cases} \frac{i}{k_0^2} j_0(k_0 \varrho) \left[t'^2 h_1^{(1)}(t') \right]_{t=0}^{k_0 \varrho_\Delta} & \text{si } \varrho < r' \\ \frac{i}{k_0^2} h_0^{(1)}(k_0 \varrho) \left[t'^2 j_1(t') \right]_{t=0}^{k_0 \varrho_\Delta} & \text{si } \varrho > r' \end{cases}, \quad (2.47)$$

avec $\varrho = |\mathbf{r} - \mathbf{r}'|$. On distingue deux cas :

1. les cellules source et d'observation sont les mêmes, on parle alors de “self-terme” (c.à.d $\varrho = 0$) et on a :

$$g^0(\mathbf{r}, \mathbf{r}') = (1 - ik_0 \varrho_\Delta) \exp(ik_0 \varrho_\Delta) - \frac{1}{k_0^2} \quad (2.48)$$

2. les deux cellules sont différentes. On a alors,

$$g^o(\mathbf{r}, \mathbf{r}') = [\sin(k_0 \varrho_\Delta) - k_0 \varrho_\Delta \cos(k_0 \varrho_\Delta)] \frac{e^{ik_0 \varrho}}{k_0^3 \varrho} \quad (2.49)$$

La seconde partie du membre de droite de l'équation 2.37 est traitée de la même façon :

1. pour le “self-terme”, on trouve selon [LC74] :

$$\begin{aligned} \lim_{\varrho_\eta \rightarrow 0} \int_{\varrho_\eta}^{\varrho_\Delta} \int_0^\pi \int_0^{2\pi} \frac{\partial^2}{\partial a_i \partial a_j} G(\vec{r}, \vec{r}') r'^2 \sin(\theta') dr' d\theta' d\phi' \\ = \delta(P_i - P_j) \frac{[1 - (1 - ik_0 \varrho_\Delta) e^{ik_0 \varrho_\Delta}]}{3}, \end{aligned} \quad (2.50)$$

2. quand les deux cellules sont différentes, on obtient l'expression suivante :

$$\begin{aligned} \frac{\partial^2}{\partial a_i \partial a_j} g^0(\mathbf{r}, \mathbf{r}') = \left((3 - 3ik_0 \varrho - k_0^2 \varrho^2) \frac{a_j - a'_j}{\varrho} \frac{a_i - a'_i}{\varrho} + \delta(P_i - P_j)(ik_0 \varrho - 1) \right) \\ \times (\sin(k_0 \varrho_\Delta) - k_0 \varrho_\Delta \cos(k_0 \varrho_\Delta)) \frac{e^{ik_0 \varrho}}{k_0^3 \varrho^3}. \end{aligned} \quad (2.51)$$

On obtient alors l'expression de la matrice correspondante à la fonction de Green en combinant les deux termes précédents :

$$g^{c(a_i, a_j)}(\mathbf{r}, \mathbf{r}') = \begin{cases} \delta_{i,j} \left[\frac{2(1 - ik_0 \varrho_\Delta) e^{ik_0 \varrho_\Delta}}{3} - 1 \right] & \text{si } \mathbf{r} = \mathbf{r}' \\ \left((3 - 3ik_0 \varrho - k_0^2 \varrho^2) \frac{\Delta_i \Delta_j}{\varrho^2} + \delta_{i,j}(ik_0 \varrho - 1 + \varrho^2 k_0^2) \right) \\ \times (\sin(k_0 \varrho_\Delta) - k_0 \varrho_\Delta \cos(k_0 \varrho_\Delta)) \frac{e^{ik_0 \varrho}}{k_0^3 \varrho^3} & \text{si } \mathbf{r} \neq \mathbf{r}' \end{cases} \quad (2.52)$$

avec $\delta_{i,j} = \delta(a_i - a_j)$ et $\Delta_i = a_i - a'_i$, $\forall i = x, y, z$.

De manière générale, on est capable d'écrire le modèle direct dans le cas de l'imagerie de diffraction, comme on l'a constaté dans les parties précédentes, sous forme de deux équations vectorielles : l'équation d'observation et l'équation de couplage (ou d'état) :

$$\mathbf{y} = \mathbf{G}^o \mathbf{X} \mathbf{E}, \quad (\text{observation}) \quad (2.53)$$

$$\mathbf{E} = \mathbf{E}^o + \mathbf{G}^c \mathbf{X} \mathbf{E}, \quad (\text{couplage}) \quad (2.54)$$

Si on calcule le champ total \mathbf{E} à partir de l'équation de couplage et si on le remplace dans l'équation d'observation, on trouve le modèle direct non linéaire :

$$\mathbf{y} = \mathbf{G}^o \mathbf{X} (\mathbf{I} - \mathbf{G}^c \mathbf{X})^{-1} \mathbf{E}^o. \quad (2.55)$$

L'existence de l'inverse de la matrice précédente est garantie sous certaines conditions [HGD77].

Dans ce travail, nous avons choisi une représentation bilinéaire du modèle en gardant les deux équations d'observation et de couplage mais avec un changement de variable. Nous faisons apparaître la densité de courants induits $\mathbf{w} = \mathbf{X} \mathbf{E}$ à la place du champ total. En multipliant l'équation de couplage par le contraste et en remplaçant par la densité de courants, nous obtenons :

$$\mathbf{y} = \mathbf{G}^o \mathbf{w}, \quad (\text{observation}) \quad (2.56)$$

$$\mathbf{w} = \mathbf{X} \mathbf{E}^o + \mathbf{X} \mathbf{G}^c \mathbf{w}. \quad (\text{couplage}) \quad (2.57)$$

Nous utilisons ces deux équations dans ce qui suit pour représenter le modèle direct pour l'imagerie de diffraction.

2.4 Validation des modèles

Dans cette section, nous vérifions la validité de trois modèles présentés dans ce chapitre : le projecteur analytique en tomographie classique, le modèle TM en milieu stratifié et le modèle 3D dans l'espace libre. Pour cela, nous utilisons des données simulées et des données réelles correspondant aux trois applications traitées dans ce travail : la tomographie X pour le projecteur analytique (2.2), la tomographie optique de diffraction pour le modèle TM (2.3.2) et l'imagerie micro-onde 3D pour le modèle 3D en espace libre 2.3.4.

Du point de vue pratique, les matrices présentées dans les modèles directs sont rarement calculées sous forme matricielle à cause de leurs grandes dimensions. Voici un exemple en tomographie classique : pour un objet de 256^3 voxels, un réseau de 256^2 récepteurs et pour 256 projections, la dimension de la matrice \mathbf{H} est 256^6 . Néanmoins, cette matrice est creuse ce qui permet de ne stocker que les éléments non nuls et nous nous retrouvons avec 60 Go à stocker. Souvent, les opérateurs de projections sont utilisés au lieu de calculer la matrice.

Dans le cas de l'imagerie de diffraction et pour les applications traitées dans cette thèse, les matrices d'observation \mathbf{G}^o et de couplage \mathbf{G}^c sont de très grandes dimensions et leur stockage en mémoire est impossible. Par exemple, dans le cas de l'imagerie

micro-onde 3D et pour un maillage de l'objet de 64^3 voxels seulement, nous aurons besoin de 9 To pour stocker la matrice. Pour pallier ce problème, nous travaillons dans le domaine de Fourier en profitant de la nature convolutionnelle et/ou corrélationnelle de l'équation de couplage. Les opérateurs équivalents dans le domaine de Fourier sont donnés dans D.5.

Le calcul du problème direct est “simple” dans le cas de la tomographie classique sachant l'opérateur de projection ($\mathbf{y} = \mathbf{H}\mathbf{x}$). Cependant, la résolution du problème direct dans le cas de l'imagerie de diffraction nécessite le calcul du champ total dans un premier temps. Ensuite, nous l'utilisons dans l'équation d'observation pour calculer la sortie du modèle. Le premier calcul nécessite la résolution d'un système d'équations linéaires $(\mathbf{I} - \mathbf{G}^c \mathbf{X}) \mathbf{E} = \mathbf{A} \mathbf{E} = \mathbf{E}^o$ où \mathbf{A} est de très grande dimension. Il existe plusieurs approches pour résoudre ce système [CJMS00] : l'élimination gaussienne (GE), la décomposition LU, les méthodes itératives comme le gradient conjugué [HS52], les méthodes de multipôles rapides (FFM) [GR87] et la méthode intégrale adaptative (AIM) [BBJ96]. Nous avons choisi dans ce travail une méthode itérative de gradient bi-conjugué stabilisée avec un calcul des opérateurs dans le domaine spectral (BiCGSTAB-FFT) [XL02]. Cette méthode permet une convergence plus rapide vers la solution par rapport à la méthode de gradient conjugué classique, mais l'erreur ne diminue pas d'une manière monotone.

2.4.1 Tomographie X

Dans cette partie, nous testons la qualité du projecteur analytique 2D proposé dans (2.2). Pour cela, nous utilisons des données théoriques et simulées : une fonction gaussienne bivariée et une image composée d'une ligne diagonale pour tester la qualité aux hautes fréquences (fig.2.9). La fonction gaussienne s'écrit sous la forme :

$$x(a_x, a_y) = \frac{1}{2\pi v_x v_y} \exp\left(-\frac{a_x^2}{2v_x^2} - \frac{a_y^2}{2v_y^2}\right), \quad (2.58)$$

où $v_x = 15, v_y = 5$. L'expression théorique de sa projection pour un capteur ponctuel est comme suit :

$$y(\theta, a_u) = \begin{cases} \frac{1}{\sqrt{2\pi(v_x^2 \tan^2(\theta) + v_y^2)}} \exp\left(-\frac{a_u^2}{(v_x^2 \tan^2(\theta) + v_y^2)}\right), & \theta \neq \frac{\pi}{2}, \frac{3\pi}{2} \\ \frac{1}{\sqrt{2\pi(v_x^2)}} \exp\left(-\frac{a_u^2}{(v_x^2)}\right), & \theta = \frac{\pi}{2} \text{ ou } \frac{3\pi}{2} \end{cases}. \quad (2.59)$$

En plus, nous comparons les résultats de projection entre plusieurs projecteurs : *radon* de Matlab qui est orienté pixel et le projecteur de Joseph qui est orienté rayon.

Nous commençons par les résultats de projection de la fonction gaussienne pour $\theta = 0$ (fig. 2.10). Nous remarquons que les trois projecteurs donnent de bons résultats de projection. En regardant les courbes d'erreur, on remarque que le projecteur de *radon* donne la plus grande erreur. Le projecteur de Joseph donne de meilleurs résultats que le projecteur analytique dans ce cas. Ceci s'explique par le fait que l'expression théorique est obtenue pour un capteur ponctuel ce qui correspond mieux à un projecteur de Joseph.

Pour comparer la qualité de notre approche dans un contexte de capteur intégral, nous calculons numériquement la projection théorique. Les résultats de projection (fig.

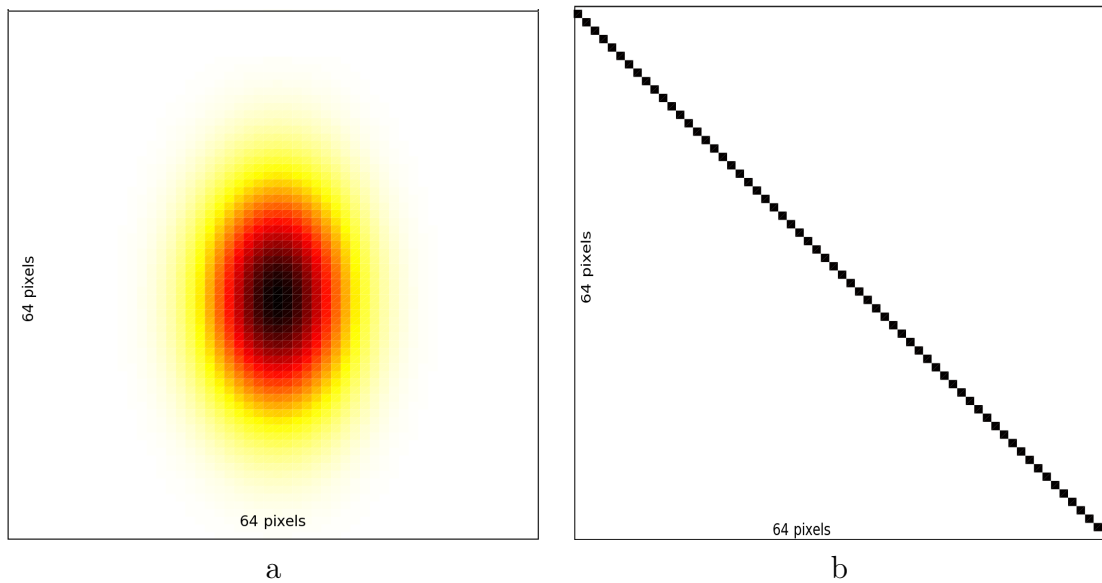


FIGURE 2.9 – Les images utilisées pour tester la qualité du projecteur proposé : a) une gaussienne bivariée, b) une fonction de Kronecker diagonale

2.11) montre une meilleure qualité pour le projecteur analytique que pour les autres projecteurs.

Pour tester la qualité de projection pour les hautes fréquences, nous appliquons une image de test composée d'une ligne diagonale avec un angle de projection $\theta = \frac{\pi}{4}$. Les résultats de projection (fig. 2.12) montre une variation très importante qui dépasse les limites théoriques pour le projecteur de Joseph. Pour le projecteur analytique, la projection respecte les limites théoriques.

2.4.2 Tomographie optique

Contrairement au cas de la tomographie X ou de l'imagerie micro-onde, nous ne disposons pas de la solution analytique de la projection de l'objet même pour les objets les plus simples. Nous comparons la sortie du modèle avec les mesures fournies par l'Institut Fresnel. La description de la configuration d'acquisition et des objets testés est donnée dans 6.2.2 et plus de détails sont donnés dans [MDG⁺09]. Deux jeux de données sont utilisés : *2pistes* (fig. 2.13) et *3pistes* (fig. 2.14).

Nous remarquons que les mesures proches de l'angle de réflexion spéculaire sont très bruitées. De plus, les mesures correspondant à cet angle sont absentes à cause de la saturation. En effet, le module de champ diffracté devient très petit devant le module de champ total. En faisant abstraction du bruit, notre modèle est assez performant pour décrire les données expérimentales.

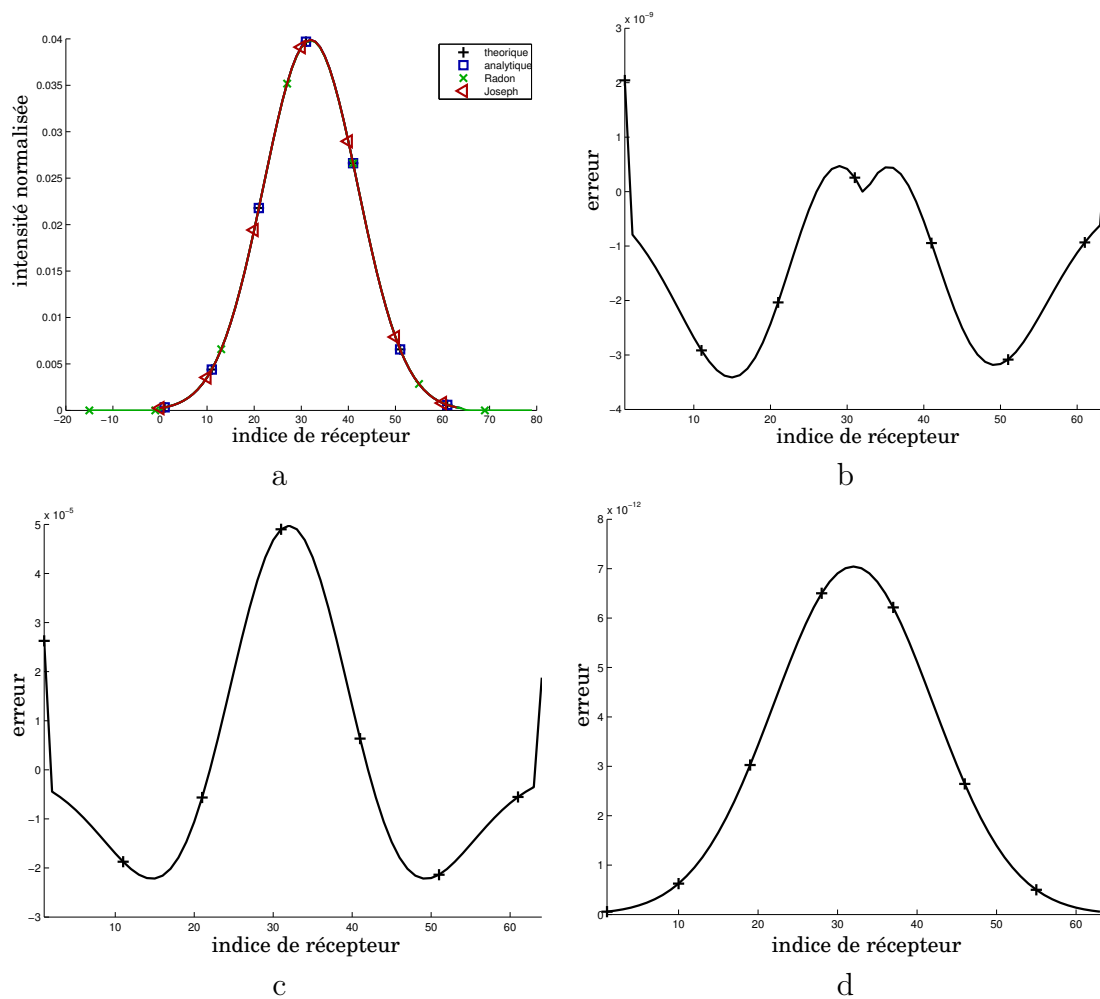


FIGURE 2.10 – Les résultats de projection de la fonction gaussienne pour $\theta = 0$: a) les projections $y(a_u)$ des projecteurs analytique, de *radon* et de Joseph , b) l’erreur entre la projection analytique et la fonction théorique, c) l’erreur de projection entre le projecteur de *radon* et la fonction théorique, d) l’erreur entre le projecteur de Joseph et la projection théorique.

2.4.3 Imagerie micro-onde

Nous testons ici la qualité de notre modèle direct dans le cas de l’imagerie de diffraction 3D dans l’espace. Dans un premier temps, nous comparons la sortie modèle avec la solution analytique (série de Mie) pour un objet sphérique éclairé avec une onde plane de fréquence 18 GHz (fig.2.16). Ensuite, nous comparons notre modélisation aux données expérimentales de l’Institut Fresnel pour l’objet *2sphères* (fig.2.17). Dans les deux cas, nous utilisons la configuration de mesure décrite dans 6.2.3 et [GCE⁺08].

La sortie du modèle coïncide quasiment avec le calcul théorique aussi bien en module qu’en phase, ce qui donne une idée de sa bonne performance. En plus, la comparaison avec les données réelles confirme cette performance.

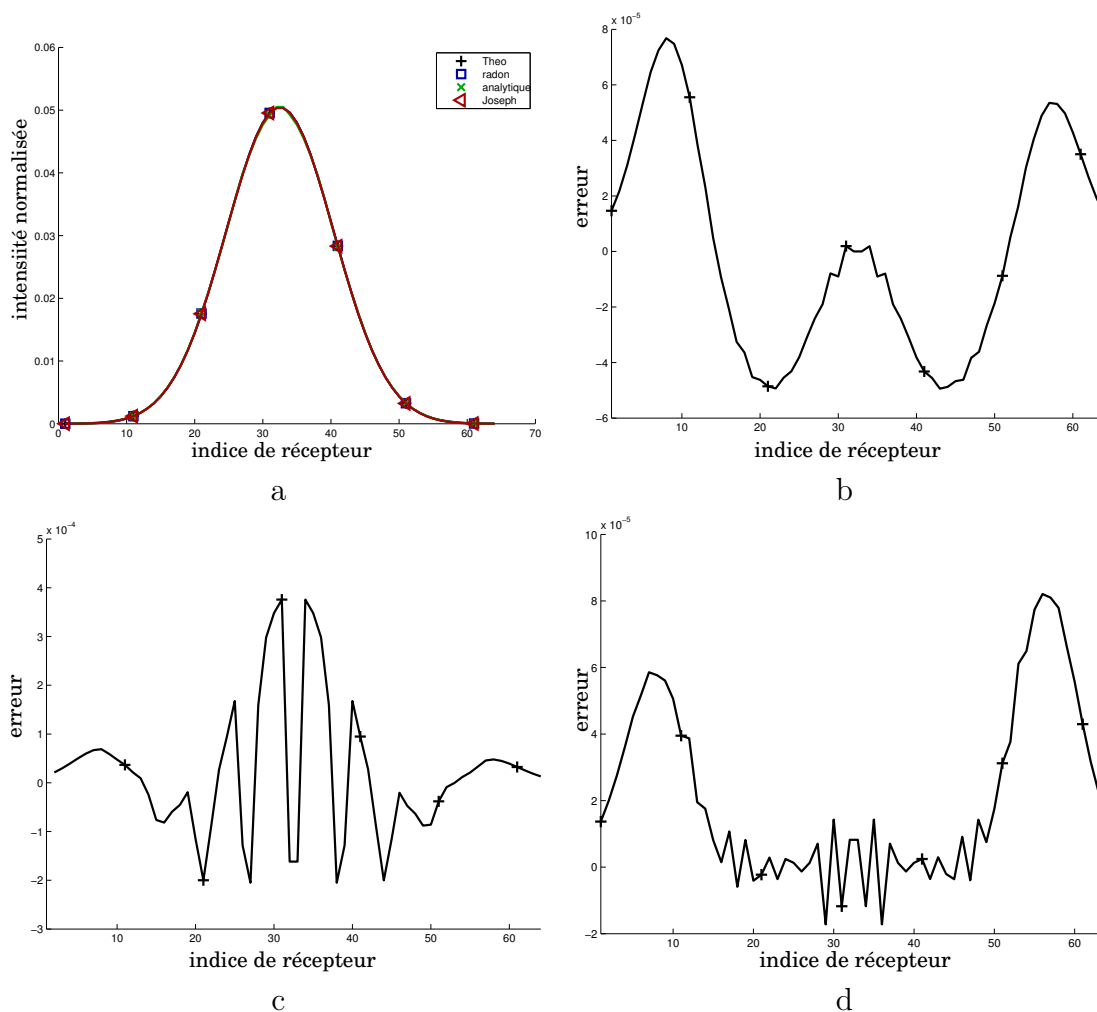


FIGURE 2.11 – Les résultats de projection de la fonction gaussienne pour $\theta = \frac{\pi}{4}$: a) les projections $y(a_u)$ des projecteurs analytique, de *radon* et de Joseph, b) l'erreur entre la projection analytique et la fonction théorique, c) l'erreur de projection entre le projecteur de *radon* et la fonction théorique, d) l'erreur entre le projecteur de Joseph et la projection théorique.

2.5 Discussion

Nous avons donné, dans ce chapitre, les modèles directs dans le cas de la tomographie classique et de l'imagerie de diffraction (2D-TM, 2D-TE, 3D). Pour la tomographie classique 2D, nous avons présenté un projecteur dit analytique qui calcule la matrice de projection en fonction de l'aire de la surface d'intersection entre un pixel et le faisceau déterminé par le capteur donné. Cette approche conduit à des équations de calcul de surfaces explicites qui facilite la mise en œuvre du projecteur. Dans le cas de l'imagerie de diffraction, le modèle direct est basé sur les équations intégrales en champ électrique et sa version discrète est obtenue par la méthode des moments.

Nous avons testé la validité des trois modèles présentés dans ce chapitre : le projecteur analytique, le modèle 2D-TM en milieu stratifié et le modèle d'imagerie de diffraction 3D. Les trois modèles ont donné de bons résultats en comparaison avec les expressions

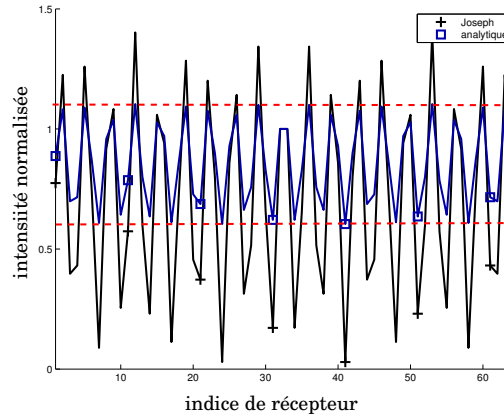


FIGURE 2.12 – Les résultats de projection de la fonction de Kronecker diagonale.

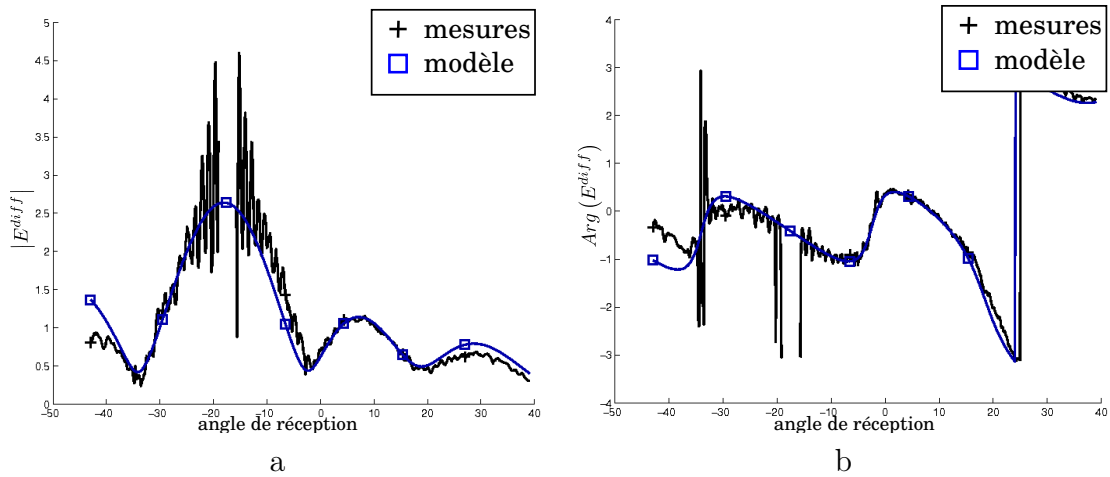


FIGURE 2.13 – Validation du modèle direct dans le cas de l'imagerie de diffraction 2D dans un milieu stratifié, application en tomographie optique de diffraction. L'objet testé est *2pistes*, et la direction d'illumination est $\theta_{inc} = -17.5^\circ$: a) le module du champ diffracté, b) la phase du champ diffracté.

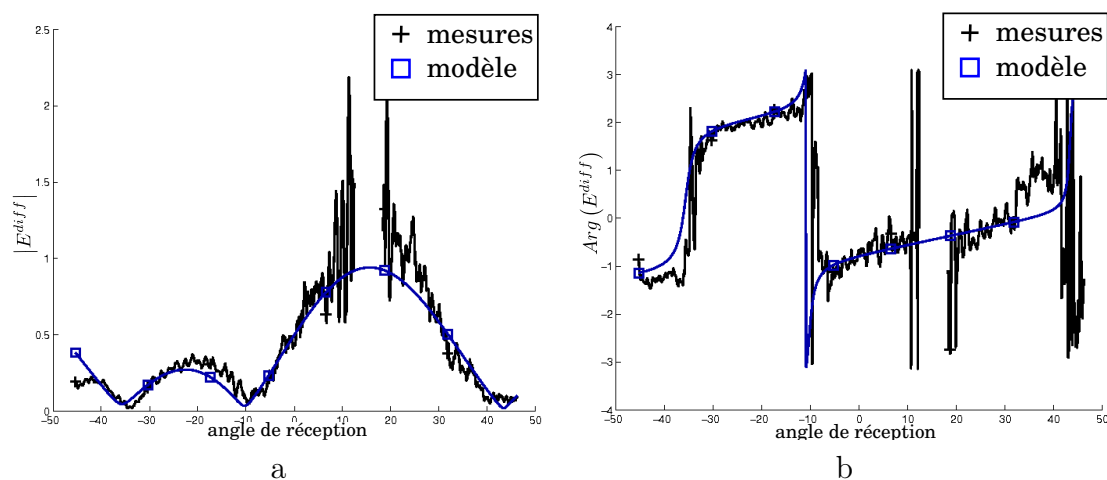


FIGURE 2.14 – Validation du modèle direct dans le cas de l’imagerie de diffraction 2D dans un milieu stratifié, application en tomographie optique de diffraction. L’objet testé est *3pistes*, la direction d’illumination est $\theta_{inc} = 15.3^\circ$: a) le module du champ diffracté, b) la phase du champ diffracté.

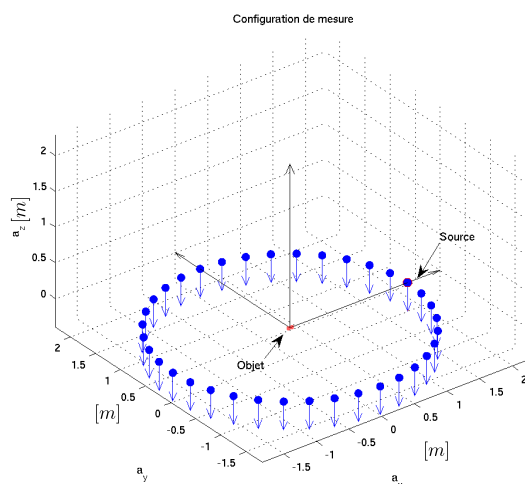


FIGURE 2.15 – Configuration de mesure pour la validation du modèle direct. Le champ incident et les mesures sont tous polarisés selon l’axe a_z .

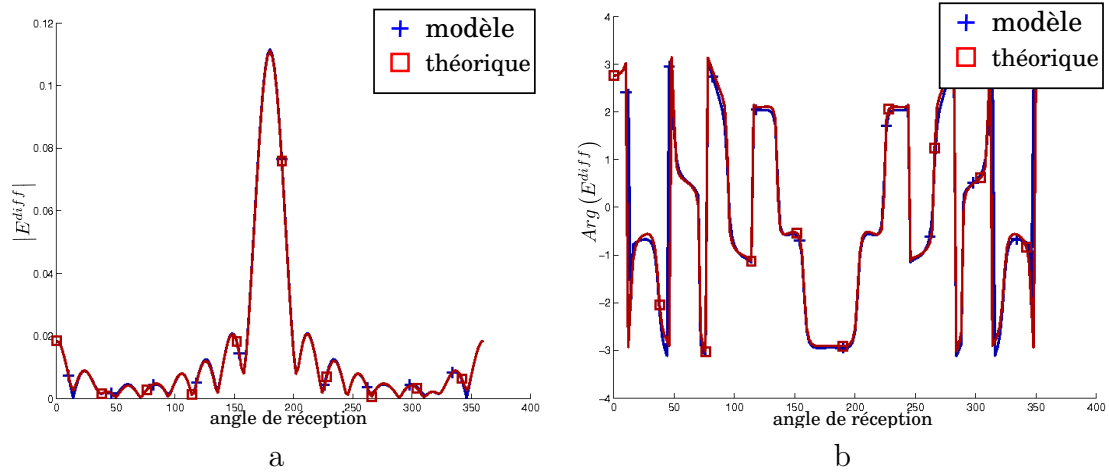


FIGURE 2.16 – Validation du modèle direct dans le cas de l'imagerie de diffraction dans l'espace libre : application en imagerie micro-onde. L'objet testé est *1sphère*, les angles d'incidence sont $\phi = 0^\circ, \phi = 90^\circ$: a) le module du champ diffracté (analytique rouge/modèle bleu) en fonction de l'angle de réception donné en degrés, b) la phase du champ diffracté (analytique rouge/modèle bleu) en fonction de l'angle de réception exprimé en degrés

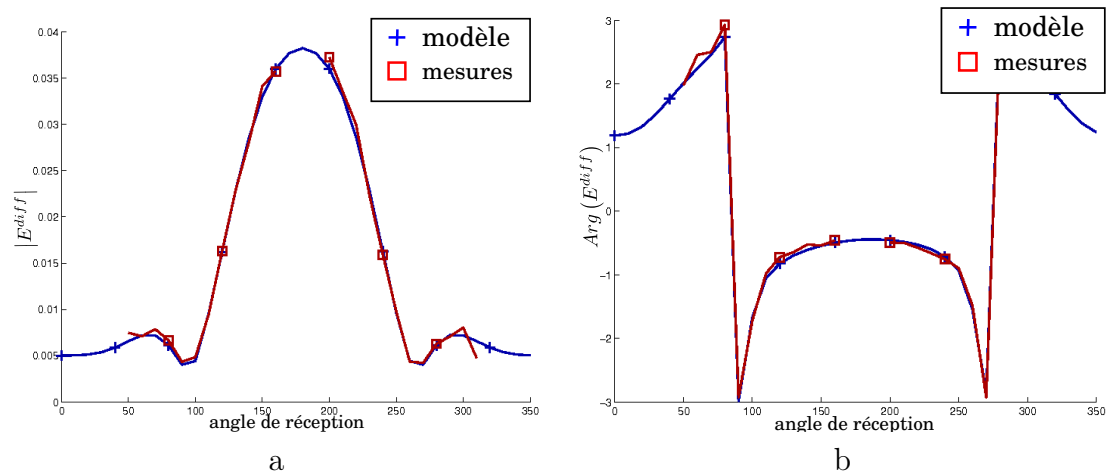


FIGURE 2.17 – Validation du modèle direct dans le cas de l'imagerie de diffraction dans l'espace libre, application en imagerie micro-onde. L'objet testé est *2sphère*, les angles d'incidence sont $\phi = 0^\circ, \phi = 90^\circ$: a) le module du champ diffracté (mesures rouge/modèle bleu) en fonction de l'angle de réception donné en degrés, b) la phase du champ diffracté (modèle rouge/ analytique bleu) en fonction de l'angle de réception donné en degrés

théoriques, les données simulées et les données expérimentales.

Dans la suite, nous présentons notre approche bayésienne pour l'inversion en mettant l'accent sur le modèle *a priori* choisi dans ce travail.

3

Modèles *a priori*

3.1 Introduction

Dans une approche bayésienne d'un problème inverse, on établit une distribution *a posteriori* des inconnues \mathbf{x} sachant les données \mathbf{y} et le modèle \mathcal{M} , en utilisant la règle de Bayes :

$$p(\mathbf{x}|\mathbf{y}; \mathcal{M}) = \frac{p(\mathbf{y}|\mathbf{x}; \mathcal{M})p(\mathbf{x}|\mathcal{M})}{p(\mathbf{y}|\mathcal{M})}, \quad (3.1)$$

où $p(\mathbf{x}|\mathbf{y}; \mathcal{M})$ est la loi *a posteriori*, $p(\mathbf{y}|\mathbf{x}; \mathcal{M})$ la vraisemblance du modèle, $p(\mathbf{x}|\mathcal{M})$ la loi *a priori* sur les inconnues et $p(\mathbf{y}|\mathcal{M})$ l'évidence du modèle \mathcal{M} . On a vu au paragraphe 1.4.3 le lien entre l'estimation au sens du MAP et la régularisation classique au sens de Tikhonov. Cette approche a l'avantage de pouvoir intégrer les informations *a priori* sous forme probabiliste. Elle permet également d'estimer les hyper-paramètres Λ du modèle (tout comme le paramètre de régularisation), avec le même outil en lui attribuant une distribution *a priori* $p(\Lambda|\mathcal{M})$ et en utilisant de nouveau la règle de Bayes pour obtenir la loi conjointe *a posteriori* :

$$p(\mathbf{x}, \Lambda|\mathbf{y}; \mathcal{M}) = \frac{p(\mathbf{y}|\mathbf{x}; \mathcal{M})p(\mathbf{x}|\Lambda; \mathcal{M})p(\Lambda|\mathcal{M})}{p(\mathbf{y}|\mathcal{M})}. \quad (3.2)$$

Dans ce chapitre, on définit les éléments nécessaires pour l'écriture de cette loi *a posteriori*. On commence par définir la vraisemblance du modèle dans les cas linéaire et non linéaire. Ensuite, on décrit notre modèle hiérarchique *a priori* représentant des objets composés d'un nombre fini de matériaux homogènes et compacts. Enfin, on donne l'expression de la loi *a posteriori* dans les deux cas et on évoquera les difficultés de calcul associées. Les détails du calcul bayésien seront donnés dans le chapitre 4 pour l'approche en échantillonnage stochastique et dans le chapitre 5 pour l'approche bayésienne variationnelle.

3.2 Vraisemblances

La vraisemblance d'un modèle donne le lien entre les données et les inconnues. Plus particulièrement, elle permet de définir la probabilité d'avoir les données \mathbf{y} connaissant les inconnues \mathbf{x} . Sa définition nécessite alors la connaissance du modèle direct et la statistique du bruit du modèle. Un choix classique pour la distribution du bruit est une loi gaussienne centrée en supposant les composantes ϵ_i indépendantes et identiquement distribuées, ce qui donne :

$$p(\boldsymbol{\epsilon}|\rho_\epsilon; \mathcal{M}) = \mathcal{N}(\mathbf{0}, \rho_\epsilon \mathbf{I}_M) = \frac{1}{(2\pi\rho_\epsilon)^{\frac{M}{2}}} \exp\left(-\frac{\|\boldsymbol{\epsilon}\|_2^2}{2\rho_\epsilon}\right), \quad (3.3)$$

où ρ_ϵ est la variance de bruit.

Dans ce qui suit, on rappelle le modèle direct dans les cas linéaire et non linéaire et on donne les termes de vraisemblances correspondants.

3.2.1 Cas linéaire

On écrit le modèle direct dans le cas linéaire en tenant compte du bruit comme suit :

$$\mathbf{y} = \mathbf{H}\mathbf{x} + \boldsymbol{\epsilon}. \quad (3.4)$$

Sous l'hypothèse d'un bruit gaussien, on trouve la vraisemblance

$$p(\mathbf{y}|\mathbf{x}, \rho_\epsilon; \mathcal{M}) = \frac{1}{(2\pi\rho_\epsilon)^{\frac{M}{2}}} \exp\left(-\frac{\|\mathbf{y} - \mathbf{H}\mathbf{x}\|_2^2}{2\rho_\epsilon}\right), \quad (3.5)$$

où la variance ρ_ϵ est inconnue et son estimation sera discutée dans le paragraphe 3.3.3.

3.2.2 Cas non linéaire

Nous adoptons dans cette thèse une approche bilinéaire pour la modélisation directe du problème d'imagerie de diffraction. On choisit l'estimation des courants induits et du contraste comme dans l'approche contraste-source proposée par [vdBK97].

$$\mathbf{y} = \mathbf{G}^o \mathbf{w} + \boldsymbol{\epsilon}, \quad (3.6)$$

$$\mathbf{w} = \mathbf{X}\mathbf{E}^o + \mathbf{X}\mathbf{G}^c \mathbf{w} + \boldsymbol{\xi}. \quad (3.7)$$

En choisissant une loi gaussienne pour les deux termes de bruit, la vraisemblance des données s'écrit :

$$p(\mathbf{y}|\mathbf{w}, \rho_\epsilon; \mathcal{M}) = \frac{1}{(2\pi\rho_\epsilon)^{\frac{M}{2}}} \exp\left(-\frac{\|\mathbf{y} - \mathbf{G}^o \mathbf{w}\|_2^2}{2\rho_\epsilon}\right). \quad (3.8)$$

En utilisant l'équation de couplage, on peut définir une deuxième vraisemblance pour les courants \mathbf{w} sachant le contraste \mathbf{x} :

$$p(\mathbf{w}|\mathbf{x}, \rho_\xi; \mathcal{M}) = \frac{1}{(2\pi\rho_\xi)^{\frac{NN_v N_f N_P}{2}}} \exp\left(-\frac{\|\mathbf{w} - \mathbf{X}\mathbf{E}^o - \mathbf{X}\mathbf{G}^c \mathbf{w}\|_2^2}{2\rho_\xi}\right). \quad (3.9)$$

Les deux variances ρ_ϵ et ρ_ξ sont, elles aussi, inconnues et leur estimation sera discutée dans le paragraphe 3.3.3.

3.3 Modèle de Gauss-Markov-Potts

Dans cette thèse, on cherche à reconstruire des objets composés d'un nombre fini de matériaux distribués en régions compactes. Dans les applications en contrôle non-destructif ou en imagerie médicale, ce choix est approprié. Nous verrons par la suite comment prendre en compte cette information *a priori*.

La première étape consiste à introduire une nouvelle variable discrète z représentant l'étiquette du matériau, $z = 1, 2, \dots, K$, où K est le nombre de matériaux composant l'objet. Ensuite, on associe à chaque pixel $x(\mathbf{r})$ un label $z(\mathbf{r})$ déterminant le matériau auquel il appartient. L'ensemble des labels de l'image forme un champ caché $\mathbf{z} = \{z(\mathbf{r}), \forall \mathbf{r} \in \mathcal{R}\}$ qui représente une image de segmentation de l'objet. Elle permet de découper l'espace de l'image \mathcal{R} en K classes, $\mathcal{R}_\kappa = \{\mathbf{r} : z(\mathbf{r}) = \kappa\}$, $\mathcal{R} = \cup_\kappa \mathcal{R}_\kappa$, où l'indice κ représente un matériau.

Les pixels dans une région \mathcal{R}_κ partagent les mêmes propriétés statistiques, comme la moyenne η_κ et la variance ρ_κ . De plus, on prend en compte la corrélation spatiale entre les éléments du champ caché par un modèle markovien. Ce modèle markovien permet de prendre en compte la nature compacte des régions. Pour la corrélation entre les pixels de l'objet, on adopte deux approches. La première consiste à considérer les pixels indépendants *a priori*, ce qui donne un modèle de mélange simple pour la mise en œuvre. Dans la seconde, on choisit un modèle markovien inhomogène dans chaque classe pour renforcer l'homogénéité des classes. Ce modèle a été proposé dans [Fér06]. Toutefois, on présente ici une extension pour le cas 3D avec une étude du paramètre de corrélation dans le modèle de Potts et son estimation.

Nous présentons par la suite les expressions des différentes composantes des lois *a priori* proposées dans ce manuscrit.

3.3.1 Contraste

Afin de représenter l'homogénéité d'une classe, nous modélisons la distribution d'un pixel par une loi gaussienne dont la moyenne représente le contraste moyen et la fluctuation autour de cette valeur est donnée par la variance. Pour chaque pixel \mathbf{r} d'une région κ , on attribue une loi gaussienne :

$$p(x(\mathbf{r})|z(\mathbf{r}) = \kappa) = \mathcal{N}(m_x(\mathbf{r}), v_x(\mathbf{r})). \quad (3.10)$$

Pour la variance $v_x(\mathbf{r})$, on choisit toujours une valeur globale liée à la classe κ ; $v_x(\mathbf{r}) = \rho_\kappa$. Cependant pour la moyenne, on adopte deux stratégies en fonction du lien spatial choisi. Dans un premier temps, on choisit un modèle conditionnellement indépendant *a priori* (MGI) qui définit la moyenne de la gaussienne d'une manière globale comme la moyenne de la classe. Ensuite, on choisit un modèle markovien où la moyenne d'un pixel dépend de ses voisins appartenant à la même classe (MGM). Dans ce qui suit, on présente la loi *a priori* jointe du contraste pour les deux modèles.

Mélange de gaussiennes conditionnellement indépendantes (MGI)

Dans ce modèle, on considère les pixels conditionnellement indépendants entre eux et chaque pixel suit une loi gaussienne dont les paramètres dépendent de la classe seulement (fig. 3.1). Pour un pixel \mathbf{r} dans une classe κ , on écrit :

$$p(x(\mathbf{r})|z(\mathbf{r}) = \kappa, \eta_\kappa, \rho_\kappa) = \mathcal{N}(\eta_\kappa, \rho_\kappa). \quad (3.11)$$

La loi *a priori* jointe devient :

$$p(\mathbf{x}|\mathbf{z}, \boldsymbol{\eta}, \boldsymbol{\rho}) = \mathcal{N}(\mathbf{m}_x, \mathbf{V}_x), \quad (3.12)$$

$$= \frac{1}{(2\pi)^{\frac{N}{2}} |\mathbf{V}_x|^{-1/2}} \exp \left(-\frac{(\mathbf{x} - \mathbf{m}_x)^T \mathbf{V}_x^{-1} (\mathbf{x} - \mathbf{m}_x)}{2} \right), \quad (3.13)$$

$$= \prod_{\kappa=1}^K \frac{1}{(2\pi\rho_\kappa)^{\frac{N_\kappa}{2}}} \exp \left(-\frac{\sum_{\mathbf{r} \in \mathcal{R}_\kappa} |x(\mathbf{r}) - \eta_\kappa|^2}{2\rho_\kappa} \right), \quad (3.14)$$

où $N_\kappa = \text{card}(\mathcal{R}_\kappa)$ est le nombre de pixel dans une classe κ .

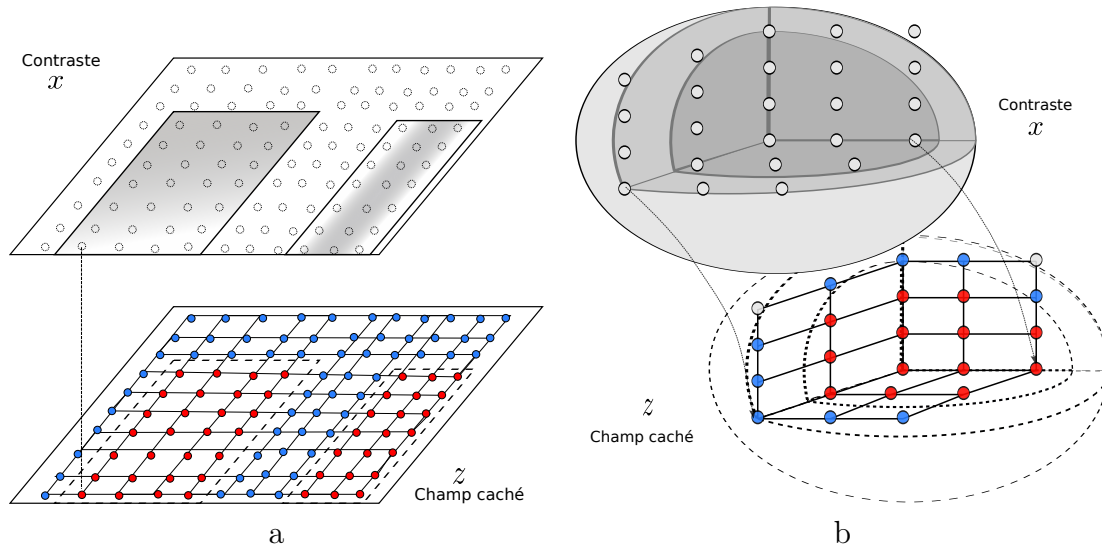


FIGURE 3.1 – Le modèle *a priori* d'un mélange de gaussiennes indépendantes (MGI). Les pixels du contraste sont considérés conditionnellement indépendants et le champ caché suit un modèle de Potts. Les liens entre les pixels représentent une dépendance probabiliste : a) le modèle MGI 2D, b) le modèle MGI 3D

Mélange de Gauss-Markov (MGM)

Dans ce modèle, on renforce les liens entre les pixels d'une même classe par un champ de Markov tout en gardant les pixels des différentes classes indépendants afin de préserver les contours. L'idée est de changer la moyenne *a priori* d'un pixel en fonction de ses voisins (fig. 3.3). On définit la moyenne *a priori* comme étant la moyenne des voisins les plus proches s'ils sont tous dans la même classe, sinon on lui attribue la

moyenne de la classe. Le potentiel de Gibbs d'un pixel sachant ses voisins et la moyenne de la classe est défini comme suit :

$$p_g(x(\mathbf{r})|z(\mathbf{r}) = \kappa, \eta_\kappa, \rho_\kappa, x(\mathbf{r}'), z(\mathbf{r}'); \forall \mathbf{r}' \in \mathcal{V}(\mathbf{r})) = \mathcal{N}(m_x(\mathbf{r}), v_x(\mathbf{r})) = \mathcal{N}(m_x(\mathbf{r}), \rho_\kappa), \quad (3.15)$$

où

$$m_x(\mathbf{r}) = \begin{cases} \frac{1}{N_V} \sum_{\mathbf{r}' \in \mathcal{V}(\mathbf{r})} x(\mathbf{r}'), & \text{si } \forall \mathbf{r}' \in \mathcal{V}(\mathbf{r}) \quad z(\mathbf{r}) = z(\mathbf{r}'), \\ \eta_\kappa & \text{si } \exists \mathbf{r}' \in \mathcal{V}(\mathbf{r}) \quad z(\mathbf{r}) \neq z(\mathbf{r}'), \end{cases} \quad (3.16)$$

où $N_V = \text{card}(\mathcal{V})$ est la taille du voisinage de \mathbf{r} . On note que dans notre application, on choisit $N_V = 4$ dans le cas 2D et $N_V = 6$ dans le cas 3D (fig. 3.2).

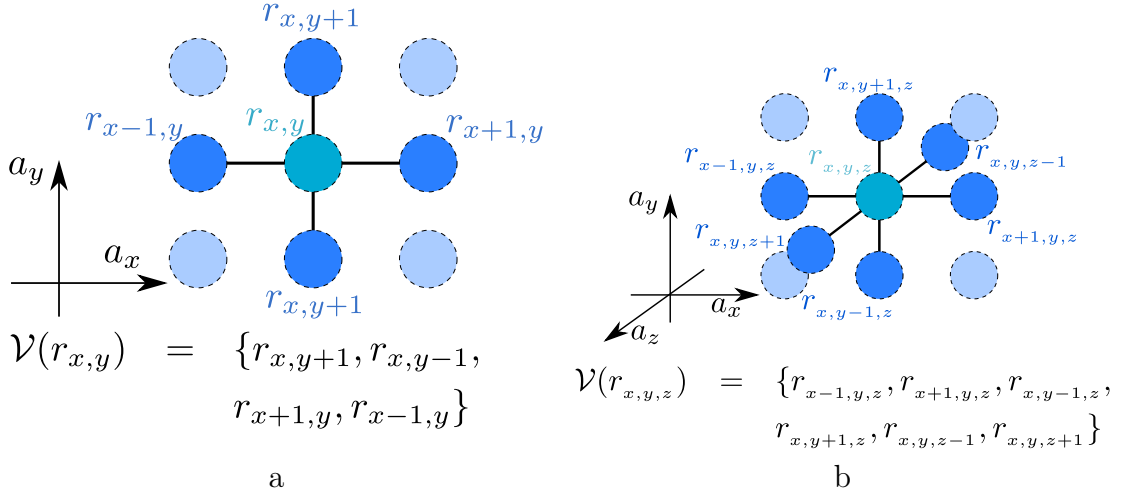


FIGURE 3.2 – La définition du voisinage : a) le cas 2D, b) le cas 3D

On peut unifier l'écriture de la moyenne *a priori* en introduisant une variable auxiliaire $\mathcal{C}(\mathbf{r}) = 1 - \prod_{\mathbf{r}' \in \mathcal{V}(\mathbf{r})} \delta(z(\mathbf{r}) - z(\mathbf{r}'))$:

$$m_x(\mathbf{r}) = \mathcal{C}(\mathbf{r})\eta_\kappa + \frac{1 - \mathcal{C}(\mathbf{r})}{N_V} \sum_{\mathbf{r}' \in \mathcal{V}(\mathbf{r})} x(\mathbf{r}'). \quad (3.17)$$

La loi jointe *a priori* du contraste sachant le champ caché s'écrit comme suit :

$$p(\mathbf{x}|\mathbf{z}, \boldsymbol{\eta}, \boldsymbol{\rho}) = \mathcal{N}(\mathbf{m}_x, \mathbf{V}_x), \quad (3.18)$$

$$= \frac{1}{(2\pi)^{\frac{N}{2}} |\mathbf{V}_x|^{-1/2}} \exp \left(-\frac{(\mathbf{x} - \mathbf{m}_x)^t \mathbf{V}_x^{-1} (\mathbf{x} - \mathbf{m}_x)}{2} \right), \quad (3.19)$$

$$= \prod_{\kappa=1}^K \frac{1}{(2\pi\rho_\kappa)^{\frac{N_\kappa}{2}} \mathbf{V}_\kappa} \exp \left(-\sum_{\mathbf{r} \in \mathcal{R}_\kappa} \left[\mathcal{C}_\kappa(\mathbf{r}) \frac{|x(\mathbf{r}) - \eta_\kappa|^2}{2\rho_\kappa} + \frac{(1 - \mathcal{C}_\kappa(\mathbf{r}))}{2N_V} \sum_{\mathbf{r}' \in \mathcal{V}(\mathbf{r})} \frac{|x(\mathbf{r}) - x(\mathbf{r}')|^2}{2\rho_\kappa} \right] \right), \quad (3.20)$$

où \mathbf{V}_κ est une constante qui dépend de la structure du voisinage seulement.

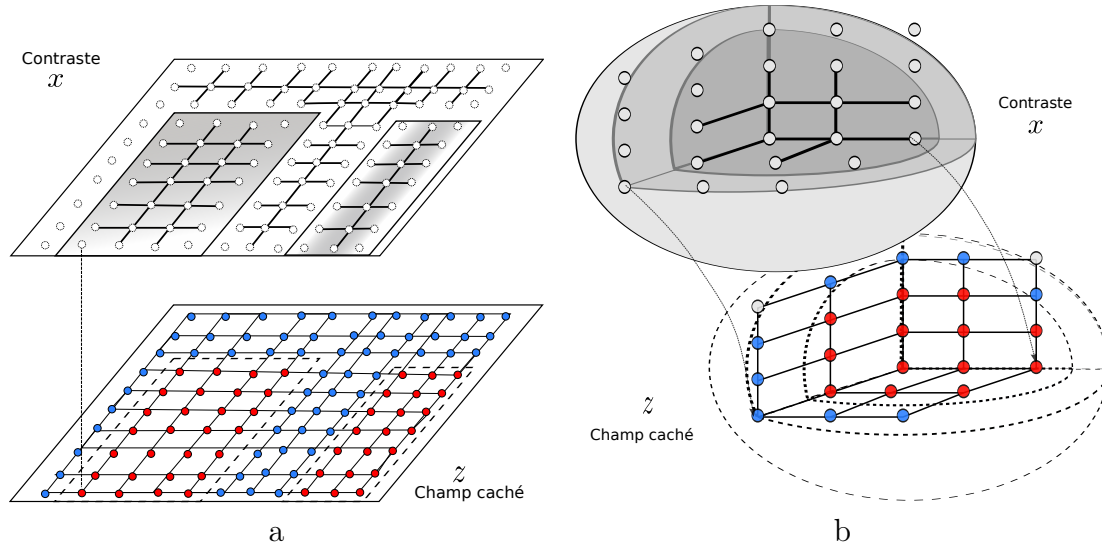


FIGURE 3.3 – Le modèle *a priori* de mélange de Gauss-Markov (MGM). Les pixels sont considérés markoviens et le champ caché suit un modèle de Potts. Les liens entre les pixels présentent une dépendance probabiliste : a) le modèle MGM 2D, b) le modèle MGM 3D

3.3.2 Champ caché

Le champ caché représente la distribution des matériaux dans l'espace. Il prend des valeurs discrètes $z(\mathbf{r}) = 1, 2, \dots, K$. On cherche, dans ce travail, à reconstruire des objets constitués de régions compactes. Cette propriété peut être représentée par un champ markovien de Potts. On favorise dans ce modèle un choix homogène des voisins dans le champ caché ; pour un pixel \mathbf{r} on choisit une probabilité d'affectation dans une classe κ proportionnelle au nombre de ses voisins appartenant à la même classe. On écrit la probabilité sous la forme :

$$p_g(z(\mathbf{r}) = \kappa | \Upsilon, z(\mathbf{r}'); \forall \mathbf{r}' \in \mathcal{V}(\mathbf{r})) \propto \exp \left(\Upsilon \sum_{\mathbf{r}' \in \mathcal{V}(\mathbf{r})} \delta(\kappa - z(\mathbf{r}')) \right), \quad (3.21)$$

où $\delta(\cdot)$ est la fonction de Kronecker et Υ est le paramètre de corrélation entre les voisins. Sa valeur détermine la taille des régions comme on le verra plus tard dans cette section.

Remarque 1 Les potentiels de Gibbs p_g ne sont pas les lois conditionnelles de la loi markovienne jointe $p_g(A|B) \neq p(A|B) = \frac{p(A,B)}{p(B)}$. Ils permettent d'avoir une factorisation de la loi jointe en produits de cliques $p(A, B) \propto p_g(A|B)p_g(B|A)$

La probabilité jointe s'écrit sous la forme :

$$\begin{aligned} p(\mathbf{z} = \boldsymbol{\kappa} | \Upsilon) &\propto \prod_{\mathbf{r}} p_g(z(\mathbf{r}) = \kappa | \Upsilon, z(\mathbf{r}'); \forall \mathbf{r}' \in \mathcal{V}(\mathbf{r})) \\ &= \frac{1}{\exp(\Xi_{\Upsilon})} \exp \left(\Upsilon \sum_{\mathbf{r} \in \mathcal{R}} \sum_{\mathbf{r}' \in \mathcal{V}(\mathbf{r})} \delta(\kappa(\mathbf{r}) - \kappa(\mathbf{r}')) \right), \end{aligned} \quad (3.22)$$

où Ξ_Υ est une constante de normalisation, en fait le logarithme de la fonction de partition, qui dépend de Υ :

$$\Xi_\Upsilon = \log \left(\sum_{\kappa} \exp \left(\Upsilon \sum_{\mathbf{r}} \sum_{\mathbf{r}' \in \mathcal{V}(\mathbf{r})} \delta(\kappa(\mathbf{r}) - \kappa(\mathbf{r}')) \right) \right). \quad (3.23)$$

Cette somme n'a de forme explicite que pour le cas $K = 2$, ce qui correspond au champ d'Ising. De plus, son évaluation numérique est pratiquement impossible car la somme sur les différentes combinaisons est de l'ordre de K^N . C'est pourquoi l'estimation de Υ reste un problème ouvert dans la littérature [GM98, Mas00, MPRB06]. Dans ce qui suit, on montre le rôle du paramètre de corrélation Υ sur l'*a priori* de Potts et on parle de la méthode d'estimation du paramètre basée sur l'approche bayésienne variationnelle dans l'annexe B.

Choix du paramètre de corrélation Υ

Le choix du paramètre de corrélation Υ joue un rôle important pour déterminer le comportement *a priori* du champ caché \mathbf{z} . Le problème posé par l'estimation de ce paramètre réside dans la dépendance implicite de la fonction de partition $\exp(\Xi_\Upsilon)$ de ce paramètre. En effet, on ne dispose d'une expression explicite de cette fonction que dans le cas du champ d'Ising ($K = 2$). Ceci rend très difficile la tâche de trouver une loi conjuguée pour ce paramètre.

Pour mieux comprendre le rôle de Υ , on montre plusieurs échantillons (réalisations) tirés de la loi *a priori* pour plusieurs valeurs de Υ dans les cas 2D et 3D (fig. 3.4 et fig. 3.5). Pour cela, on développe un échantillonneur itératif de Gibbs qui permet de tirer des échantillons du champ joint à partir des échantillons des lois conditionnelles. On verra plus en détail cet échantillonneur dans le paragraphe 4.5.2. On réécrit le champ de Potts sous la forme suivante :

$$p(\mathbf{z} = \kappa | \Upsilon) = \exp(\Upsilon \varphi(\kappa) - \Xi_\Upsilon), \quad (3.24)$$

où $\varphi(\kappa) = \sum_{\mathbf{r}} \sum_{\mathbf{r}' \in \mathcal{V}(\mathbf{r})} \delta(\kappa(\mathbf{r}) - \kappa(\mathbf{r}'))$ est une fonction d'énergie de Potts.

On remarque que pour de petites valeurs de Υ , les échantillons du champ de Potts sont plutôt granulés. Ceci peut être déduit du cas $\Upsilon = 0$ où le champ de Potts est complètement indépendant et s'écrit :

$$p(\mathbf{z} = \kappa | \Upsilon = 0) = \frac{1}{K}. \quad (3.25)$$

Pour des valeurs plus grandes de Υ , les échantillons ont un comportement plus homogène et les régions sont plus compactes avec des dimensions de plus en plus importantes. En plus pour le cas 3D, pour le même nombre de classes, on trouve que les échantillons tendent plus rapidement vers des régions compactes.

Pour mieux comprendre ce comportement, on cherche la valeur de Υ qui maximise la probabilité d'avoir une configuration donnée κ_m :

$$\Upsilon_m = \arg \max_{\Upsilon} p(\mathbf{z} = \kappa_m | \Upsilon). \quad (3.26)$$

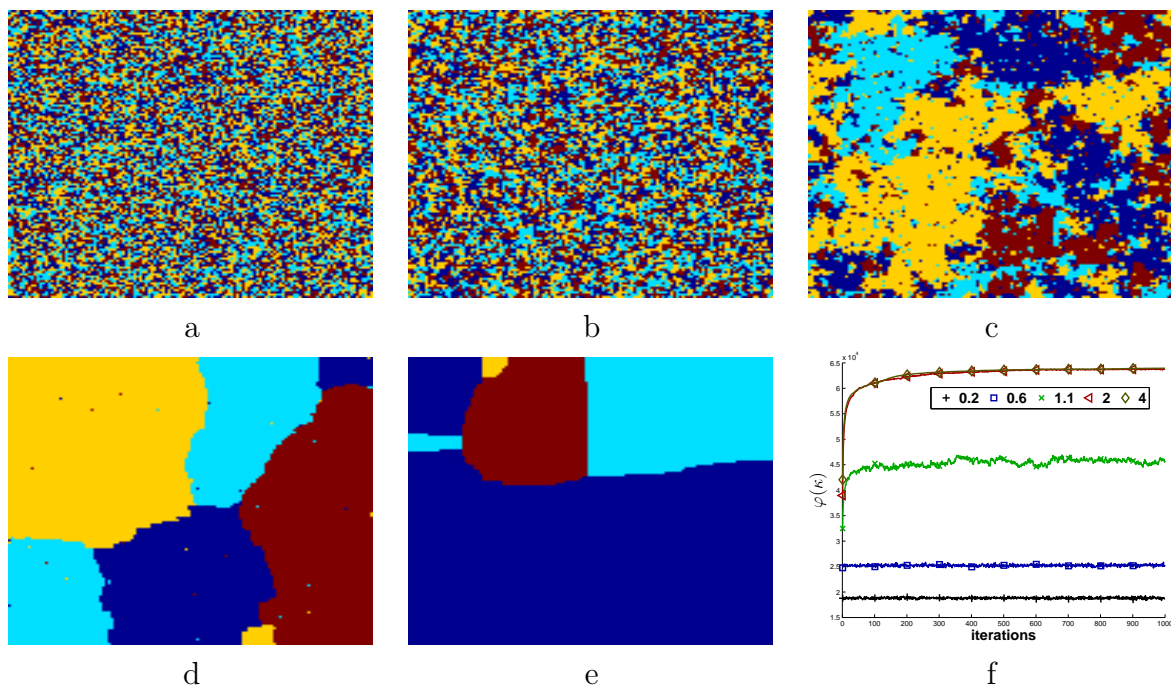


FIGURE 3.4 – Des échantillons de la loi de Potts pour quatre classes ($K = 4$) et pour plusieurs valeurs de Υ dans le cas 2D : a) $\Upsilon = 0.2$, b) $\Upsilon = 0.6$, c) $\Upsilon = 1.1$, d) $\Upsilon = 2$, e) $\Upsilon = 4$, f) évolution de l'énergie du champ $\varphi(\kappa)$ au cours des itérations de l'échantillonneur (permet de montrer la convergence des échantillons).

Pour cela on prend la dérivée du logarithme de la probabilité pour rendre les calculs plus faciles :

$$\log(p(\mathbf{z} = \kappa | \Upsilon)) = \Upsilon \varphi(\kappa_m) - \Xi_{\Upsilon}, \quad (3.27)$$

$$\frac{d \log(p(\mathbf{z} = \kappa | \Upsilon))}{d\Upsilon} = \varphi(\kappa_m) - \dot{\Xi}_{\Upsilon}, \quad (3.28)$$

$$\Upsilon_m \Rightarrow \dot{\Xi}_{\Upsilon_m} = \varphi(\kappa_m). \quad (3.29)$$

Ceci montre le lien entre l'énergie du champ $\varphi(\kappa)$ et la fonction de partition. En effet, la valeur du maximum de vraisemblance ne maximise pas seulement la configuration κ_m mais toutes les configurations κ qui ont la même énergie que κ_m , (c.à.d $\varphi(\kappa) = \varphi(\kappa_m)$). On justifie alors le choix de Υ par rapport à l'énergie $\varphi(\kappa)$. L'énergie du champ de Potts mesure l'homogénéité par rapport au voisinage. Elle varie entre 0 (tous les pixels sont différents de leurs voisins) et une énergie maximale $N * N_{\mathcal{V}}$ (tous les pixels sont dans la même classe). Pour favoriser les régions compactes, on cherche à augmenter l'énergie du champ tout en gardant une valeur acceptable pour que les voisins ne dominent pas le terme de vraisemblance lors de la segmentation. C'est pourquoi le choix du paramètre Υ est important.

Pour étudier l'évolution de l'énergie en fonction du paramètre de corrélation, il faut étudier la fonction $\dot{\Xi}_{\Upsilon}$. Malheureusement, son expression explicite n'est disponible que pour le champ d'Ising $K = 2$ dans le cas 2D [Gio10b]. En plus il est très coûteux en terme de complexité de calcul, ce qui rend son évaluation numérique impossible. Son évaluation en fonction de Υ montre qu'il est monotone et présente un changement de courbure au point Υ_c (l'énergie évolue rapidement avant et très lentement après)(fig.

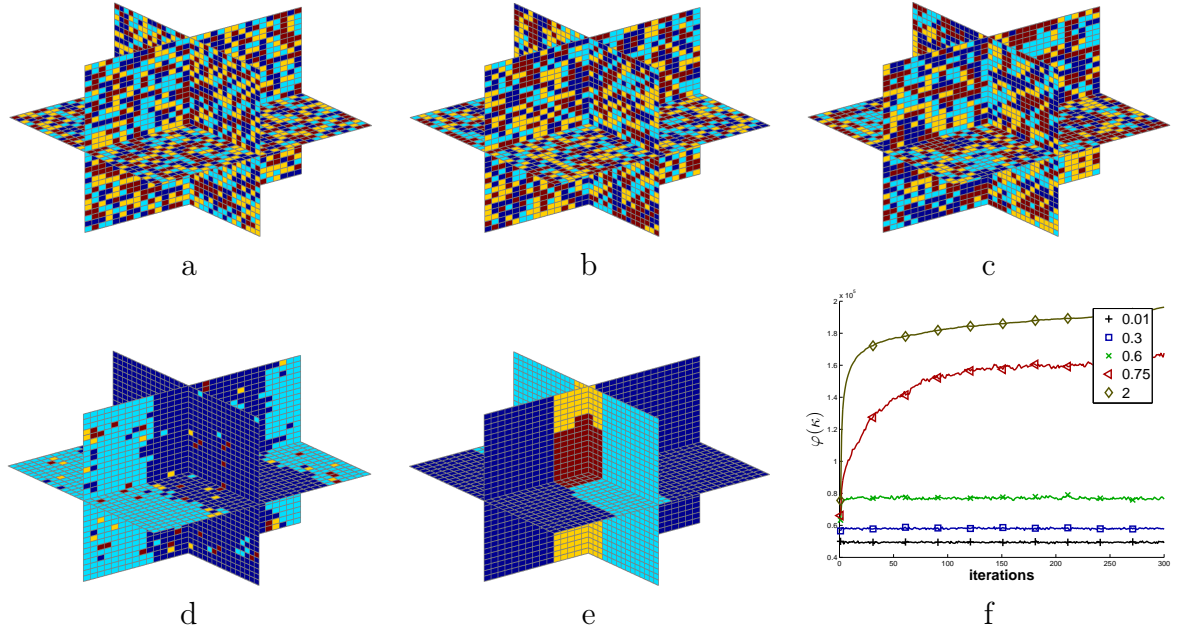


FIGURE 3.5 – Des échantillons de la loi de Potts pour quatre classes ($K = 4$) et pour plusieurs valeurs de Υ dans le cas 3D : a) $\Upsilon = 0.01$, b) $\Upsilon = 0.3$, c) $\Upsilon = 0.6$, d) $\Upsilon = 0.75$, e) $\Upsilon = 2$, f) évolution de l'énergie du champ $\varphi(\kappa)$ au cours des itérations de l'échantillonneur (il permet de montrer la convergence des échantillons).

3.6.a). En étudiant la dérivée seconde $\ddot{\Xi}_{\Upsilon}$ (fig. 3.6.b), on trouve que ce point correspond au maximum de cette fonction. On appelle Υ_c la valeur critique du champ caché qui sépare d'une manière grossière le mode des régions granulées du mode des régions compactes. Son étude est importante lorsqu'on n'estime pas la valeur optimale de Υ . Dans le cas 2D, on dispose de l'expression analytique des valeurs critiques Υ_c en fonction du nombre de classes K (fig. 3.7).

Pour $K > 3$ et notamment dans le cas 3D, on peut étudier l'évolution de l'énergie du champ en fonction de Υ d'une manière numérique avec une méthode d'échantillonnage. L'idée est de générer plusieurs échantillons pour une valeur donnée de Υ et ensuite de moyenner leurs énergies pour avoir une estimation de l'énergie correspondante (fig. 3.8). On peut calculer numériquement les valeurs critiques Υ_c en fonction du nombre de classes pour pouvoir fixer raisonnablement ce paramètre dans le cas 3D.

Pour l'estimation jointe de ce paramètre avec le champ caché, nous avons proposé une méthode basée sur l'approche variationnelle. L'idée est d'approcher la loi *a posteriori* jointe $p(\mathbf{z}|\Upsilon, \mathbf{y})$ par une loi séparable $q(\mathbf{z}|\Upsilon) = \prod_{\mathbf{r}} q(\mathbf{z}(\mathbf{r}))$ minimisant la divergence de Kullback. Ensuite, on utilise la loi approchante pour estimer la valeur de Υ . Les détails de cette méthode sont donnés dans l'annexe B.

3.3.3 Hyper-paramètres

Nous avons choisi, dans ce travail, une approche non supervisée où tous les paramètres du modèle sont estimés. Pour cela, on choisit une approche d'estimation jointe utilisant le même mécanisme. Pour faciliter les notations, on note $\psi =$

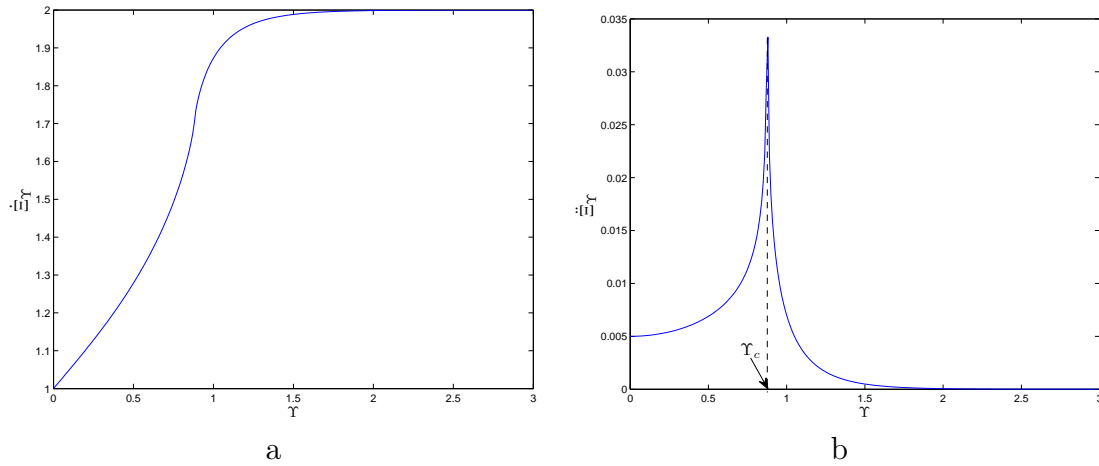


FIGURE 3.6 – L'évaluation de la dérivée de la fonction de partition analytique en fonction du paramètre de corrélation Υ dans le cas du champ d'Ising : a) la dérivée première $\dot{\Xi}_{\Upsilon}$, b) la dérivée seconde $\ddot{\Xi}_{\Upsilon}$

$\{\rho_{\epsilon}, \rho_{\xi}, \eta_{\kappa}, \rho_{\kappa}, \forall \kappa = 1, \dots, K\}$ l'ensemble des hyper-paramètres qui sont estimés dans notre modèle. Les lois *a priori* sur les hyper-paramètres du modèle sont choisies dans la famille conjuguée (c.à.d la loi *a posteriori* est dans la même famille que la loi *a priori*). Ce choix permet de faciliter le calcul des estimateurs comme on le verra plus tard dans les chapitres 4 et 5.

Moyennes

Pour les moyennes des classes $\eta_{\kappa}, \forall \kappa = 1, \dots, K$, on choisit un *a priori* gaussien. Les paramètres de forme η_0 et τ_0 sont fixés pour toutes les moyennes pour avoir un *a priori* suffisamment non informatif (plat) :

$$p(\eta_{\kappa} | \eta_0, \tau_0) = \mathcal{N}(\eta_0, \tau_0), \quad \forall \kappa = 1, \dots, K. \quad (3.30)$$

Il est possible de choisir certaines valeurs selon des informations *a priori* (comme le choix de l'*a priori* de fond de l'image).

Variances des classes

Pour l'estimation des variances des classes $\rho_{\kappa}, \forall \kappa = 1, \dots, K$, nous utilisons comme *a priori* une loi inverse gamma :

$$p(\rho_{\kappa} | \gamma_0, \phi_0) = \mathcal{IG}(\gamma_0, \phi_0), \quad (3.31)$$

où γ_0 et ϕ_0 sont les paramètres de forme fixés pour toutes les classes.

Cet *a priori* sur les paramètres de forme permet de fixer la valeur minimale de la variance estimée. Cela joue un rôle important pour la fusion entre deux classes adjacentes quand le nombre de classes utilisé est plus important que le nombre de classes réel.

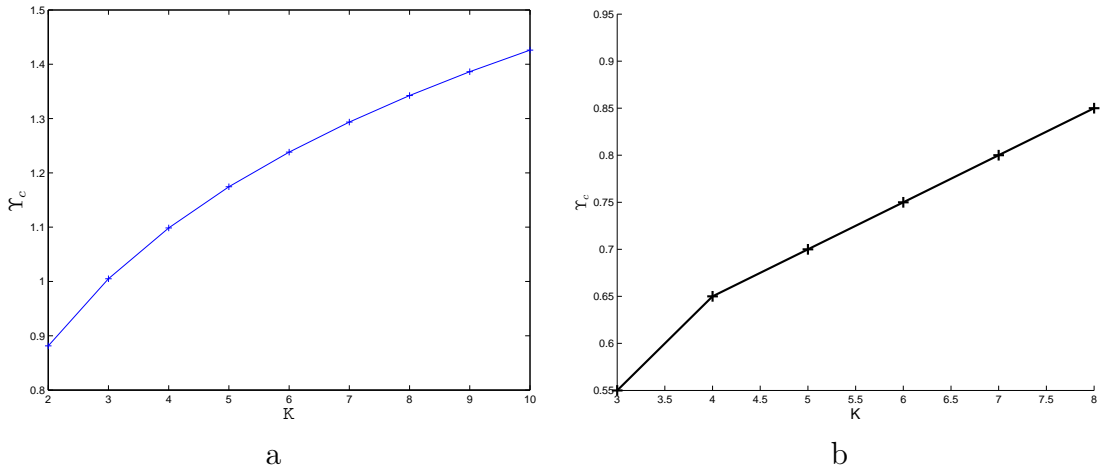


FIGURE 3.7 – Les valeurs critiques du paramètre de corrélation Υ_c en fonction du nombre de classes K : a) analytique dans le cas d'un champ de Potts 2D, b) numérique dans le cas d'un champ de Potts 3D

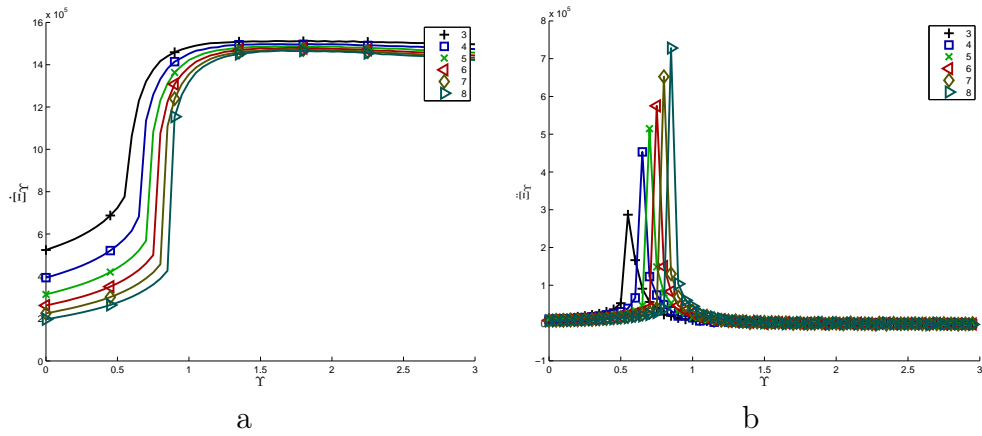


FIGURE 3.8 – L'évaluation de la dérivée de la fonction de partition en fonction du paramètre de corrélation Υ dans le cas d'un champ de Potts 3D : a) la dérivée première Ξ_Υ , b) la dérivée seconde Ξ_Υ^2

Variances de bruit

On choisit des lois *a priori* conjuguées pour la variance du bruit d'observation et du bruit de couplage :

$$p(\rho_\epsilon | \gamma_\epsilon, \phi_\epsilon) = \mathcal{IG}(\gamma_\epsilon, \phi_\epsilon), \quad (3.32)$$

$$p(\rho_\xi | \gamma_\xi, \phi_\xi) = \mathcal{IG}(\gamma_\xi, \phi_\xi), \quad (3.33)$$

où $\gamma_\epsilon, \phi_\epsilon, \gamma_\xi$ et ϕ_ξ sont les paramètres de forme choisis pour garder un *a priori* plat.

3.4 Estimation Jointe

Nous avons donné dans cette section, les ingrédients nécessaires pour obtenir la loi *a posteriori* dans le cas du modèle linéaire et du modèle non linéaire (bilinéaire) dit contraste-source. Notamment, nous avons présenté notre modèle *a priori* hiérarchique qui prend en compte l'homogénéité par régions de l'objet à imager (fig. 3.4).

Dans ce qui suit, on donne l'expression de la loi *a posteriori* pour les deux modélisations directes en montrant la difficulté d'obtenir directement des estimateurs analytiques de la loi. Ensuite, on introduit les deux méthodes d'approximation proposées dans cette thèse, qui seront détaillées dans les deux chapitres qui suivent.

Le cas linéaire

$$p(\mathbf{x}, \mathbf{z} = \mathbf{k}, \psi | \mathbf{y}; \mathcal{M}) = \frac{p(\mathbf{y} | \mathbf{x}, \rho_\epsilon; \mathcal{M}) p(\mathbf{x} | \mathbf{z}, \boldsymbol{\eta}, \boldsymbol{\rho}; \mathcal{M}) p(\mathbf{z} | \Upsilon; \mathcal{M}) p(\psi)}{p(\mathbf{y} | \mathcal{M})} \quad (3.34)$$

$$\begin{aligned} & \propto \frac{\gamma_0^{K(\phi_0-1)} \gamma_\epsilon^{\phi_\epsilon-1}}{(2\pi)^{\frac{M+N+K}{2}} (\rho_\epsilon)^{\frac{M}{2}} |\mathbf{V}_x|^{-1/2} (\tau_0)^{\frac{K}{2}} (\Gamma(\phi_0))^K \Gamma(\phi_\epsilon) \exp(\Xi_\Upsilon)} \\ & \times \exp\left(-\frac{\|\mathbf{y} - \mathbf{H}\mathbf{x}\|_2^2}{2\rho_\epsilon} - \frac{(\mathbf{x} - \mathbf{m}_x)^T \mathbf{V}_x^{-1} (\mathbf{x} - \mathbf{m}_x)}{2}\right) \rho_\epsilon^{-\phi_\epsilon-1} \exp\left(-\frac{\gamma_\epsilon}{\rho_\epsilon}\right) \\ & \times \exp\left(\Upsilon \sum_{\mathbf{r} \in \mathcal{R}} \sum_{\mathbf{r}' \in \mathcal{V}\mathbf{r}} \delta(k(\mathbf{r}) - k(\mathbf{r}'))\right) \prod_{\kappa=1}^K \rho_\kappa^{-\phi_0-1} \exp\left(-\frac{\gamma_0}{\rho_\kappa}\right) \exp\left(-\frac{|\eta_\kappa - \eta_0|^2}{2\tau_0}\right). \end{aligned} \quad (3.35)$$

Le cas non linéaire

$$\begin{aligned} & p(\mathbf{w}, \mathbf{x}, \mathbf{z} = \mathbf{k}, \psi | \mathbf{y}; \mathcal{M}) \\ & = \frac{p(\mathbf{y} | \mathbf{w}, \rho_\epsilon; \mathcal{M}) p(\mathbf{w} | \mathbf{x}, \rho_\xi; \mathcal{M}) p(\mathbf{x} | \mathbf{z}, \boldsymbol{\eta}, \boldsymbol{\rho}; \mathcal{M}) p(\mathbf{z} | \Upsilon; \mathcal{M}) p(\psi)}{p(\mathbf{y} | \mathcal{M})} \\ & \propto \frac{\gamma_0^{K(\phi_0-1)} \gamma_\epsilon^{\phi_\epsilon-1} \gamma_\xi^{\phi_\xi-1}}{(2\pi)^{\frac{M+N(N_P+1)+K}{2}} (\rho_\epsilon)^{\frac{M}{2}} (\rho_\xi)^{\frac{N \times N_P}{2}} |\mathbf{V}_x|^{-1/2} (\tau_0)^{\frac{K}{2}} (\Gamma(\phi_0))^K \Gamma(\phi_\epsilon) \Gamma(\phi_\xi)} \\ & \times \exp\left(-\frac{\|\mathbf{y} - \mathbf{G}^o \mathbf{w}\|_2^2}{2\rho_\epsilon} - \frac{\|\mathbf{w} - \mathbf{X}\mathbf{E}^o - \mathbf{X}\mathbf{G}^c \mathbf{w}\|_2^2}{2\rho_\xi} - \frac{(\mathbf{x} - \mathbf{m}_x)^T \mathbf{V}_x^{-1} (\mathbf{x} - \mathbf{m}_x)}{2}\right) \\ & \times \exp\left(\Upsilon \sum_{\mathbf{r} \in \mathcal{R}} \sum_{\mathbf{r}' \in \mathcal{V}\mathbf{r}} \delta(k(\mathbf{r}) - k(\mathbf{r}')) - \Xi_\Upsilon\right) \rho_\epsilon^{-\phi_\epsilon-1} \exp\left(-\frac{\gamma_\epsilon}{\rho_\epsilon}\right) \\ & \times \rho_\xi^{-\phi_\xi-1} \exp\left(-\frac{\gamma_\xi}{\rho_\xi}\right) \prod_{\kappa=1}^K \rho_\kappa^{-\phi_0-1} \exp\left(-\frac{\gamma_0}{\rho_\kappa}\right) \exp\left(-\frac{|\eta_\kappa - \eta_0|^2}{2\tau_0}\right). \end{aligned} \quad (3.36)$$

L'expression de l'estimateur joint au sens du maximum *a posteriori* (MAP) est difficile à trouver à cause de la complexité de la loi *a posteriori*. Ceci est également valable pour l'estimateur au sens de l'espérance *a posteriori* (EAP) où les intégrales ne mènent pas à une solution explicite. C'est pourquoi, on a besoin de calculer ces estimateurs d'une manière approchée. Il existe deux méthodes pour cela : l'une numérique et l'autre analytique. Nous avons étudié dans cette thèse les deux approches avec l'échantillonnage MCMC comme méthode numérique et l'approche bayésienne variationnelle comme méthode analytique.

3.5 Discussion

Nous avons présenté dans ce chapitre notre approche bayésienne de l'inversion où nous avons utilisé un modèle *a priori* de Gauss-Markov-Potts. Le choix de ce modèle *a priori* a été motivé par la nature des objets auxquels nous nous intéressons dans des applications en contrôle non destructif. L'idée de base est que ces objets sont composés d'un nombre fini de matériaux homogènes. Deux variantes sont présentées : MGI qui considère les pixels indépendants entre eux et MGM qui suppose un modèle markovien entre les éléments de la même région. Cependant, la variable cachée, qui représente l'étiquette du type de matériau, est modélisée par un champ de Potts. Les *a priori* des hyperparamètres de ce modèle sont choisis d'une manière conjuguée pour faciliter le calcul de la loi *a posteriori*. Enfin après avoir explicité les expressions de vraisemblance, l'expression de la loi *a posteriori* est obtenue dans les cas linéaire et non linéaire.

Dans les deux chapitres qui suivent, nous présentons une approximation du calcul bayésien. Nous présentons, dans le chapitre 4, la technique d'échantillonnage stochastique et, notamment, la méthode d'échantillonnage de Gibbs qui permet d'obtenir des échantillons d'une loi conjointe à partir des échantillons de la loi conditionnelle. Ensuite, nous détaillons l'approche bayésienne variationnelle dans le chapitre 5.

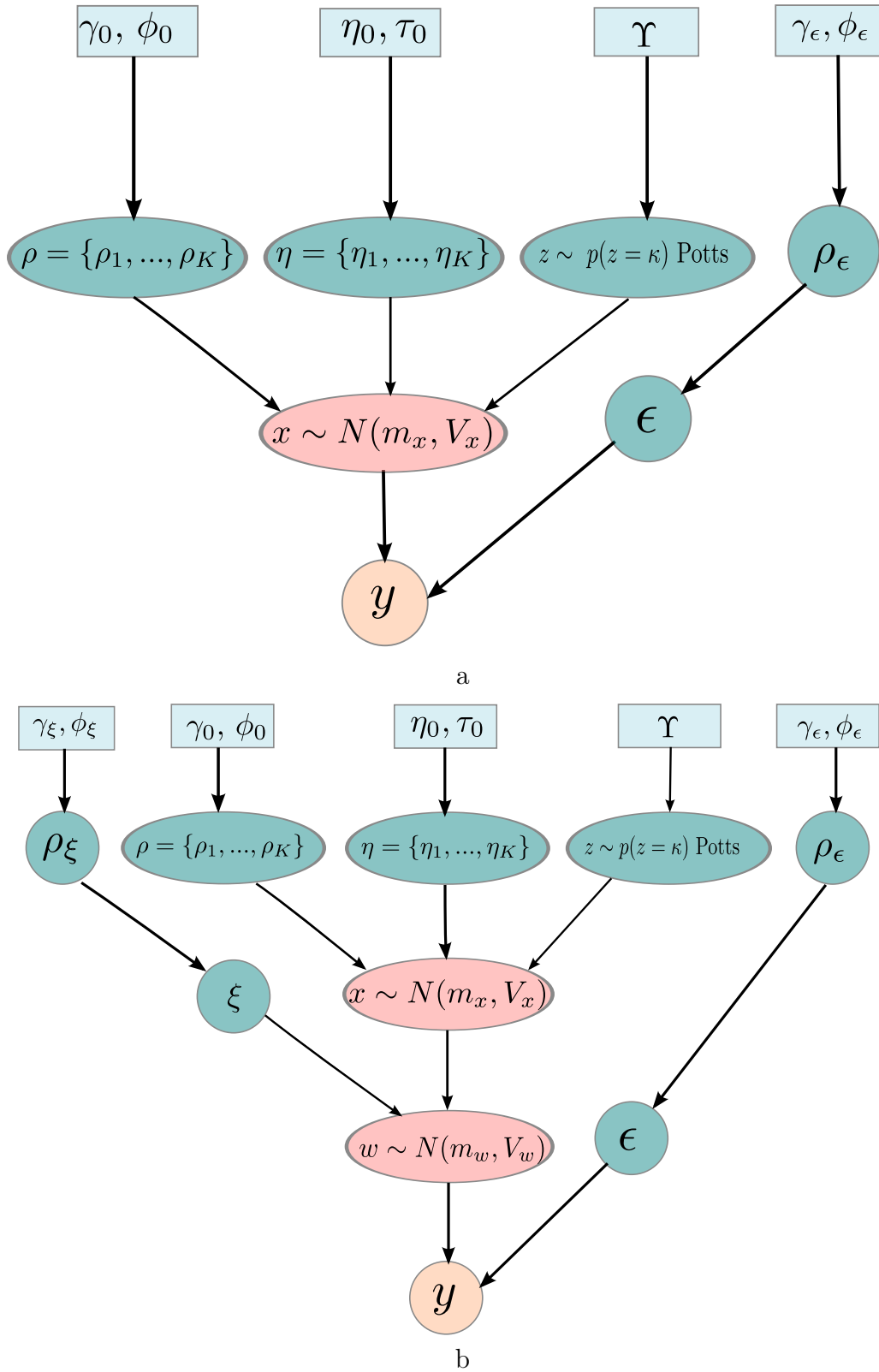


FIGURE 3.9 – Le modèle *a priori* hiérarchique proposé pour la reconstruction de l'objet : a) le modèle hiérarchique dans le cas d'une modélisation directe linéaire, b) le modèle hiérarchique dans le cas d'une modélisation directe non linéaire.

4

L'échantillonnage stochastique

4.1 Introduction

Une première méthode, pour l'approximation d'une loi de probabilité $p(\mathbf{x})$, consiste à l'approcher par des échantillons numériques $\mathbf{x}^1, \mathbf{x}^2, \dots, \mathbf{x}^L$. Ensuite on peut utiliser ces échantillons pour calculer les moments de p ou estimer la valeur correspondant au maximum à l'aide d'un histogramme. En pratique, cette approche est plus adaptée pour les estimateurs au sens de l'espérance *a posteriori* (EAP) :

$$\hat{x} = \langle x \rangle_{p(\mathbf{x})} = \int_{\mathbb{N}} \mathbf{x} p(\mathbf{x}) d\mathbf{x} \approx \frac{1}{L} \sum_{l=1}^L \mathbf{x}^l. \quad (4.1)$$

Dans le cas des lois de probabilité de très grandes dimensions ($|\mathbb{N}| \gg 1$), le choix d'une méthode d'échantillonnage efficace (c'est-à-dire qui permet de construire une meilleure approximation de la loi dans un minimum de temps) est essentiel. La difficulté de tirer des échantillons est due au manque de connaissance de la fonction de partition de la loi étudiée sauf pour des cas particuliers comme la loi gaussienne multivariée. En effet $p(\mathbf{x})$ s'écrit :

$$p(\mathbf{x}) = \frac{p'(\mathbf{x})}{\exp(\Xi_p)}, \quad (4.2)$$

où $p'(\mathbf{x})$ est la densité non normalisée de p et Ξ_p le logarithme de la fonction de partition $\Xi_p = \log \left(\int_{\mathbf{x}} p'(\mathbf{x}) d\mathbf{x} \right)$.

Dans la littérature, on trouve plusieurs méthodes qui ont été développées pour échantillonner efficacement une loi de probabilité ou calculer directement la valeur de l'intégrale dans le calcul de l'estimateur.

On présente, dans ce qui suit, cinq méthodes d'échantillonnage de base. Pour toutes ces méthodes, on suppose qu'on est capable d'évaluer la densité non normalisée $p'(\mathbf{x})$ en tout point de l'espace. Ensuite nous donnons la méthode adoptée pour notre problème et nous développons les équations nécessaires pour obtenir les échantillons.

4.1.1 L'échantillonnage d'importance

Cette méthode peut être utilisée pour calculer directement l'estimateur au sens de l'espérance *a posteriori*. Pour cela, on génère des échantillons suivant une loi $q(\mathbf{x})$ plus facilement simulable. Ensuite, on utilise ces échantillons pour calculer la moyenne avec un facteur qui dépend des deux densités $p(\mathbf{x})$ et $q(\mathbf{x})$. Soit $q(\mathbf{x})$ la densité d'échantillonnage qui s'écrit sous la forme :

$$q(\mathbf{x}) = \frac{q'(\mathbf{x})}{\exp(\Xi_q)}. \quad (4.3)$$

On suppose qu'on est capable de générer des échantillons selon cette distribution. On génère L échantillons $\{\mathbf{x}_l\}_{l=1}^L$ selon la loi $q(\mathbf{x})$ puis on calcule l'estimateur en utilisant l'équation 4.1. Néanmoins pour les intervalles où $q(\mathbf{x})$ est supérieure à $p(\mathbf{x})$, les échantillons seront sur-représentés. De la même façon, les échantillons seront sous-représentés pour les intervalles où $q(\mathbf{x})$ est inférieure à $p(\mathbf{x})$. C'est pourquoi on calcule la moyenne pondérée par les poids α_l :

$$\alpha_l = \frac{p'(\mathbf{x})}{q'(\mathbf{x})}, \quad (4.4)$$

et l'estimateur s'écrit alors sous la forme :

$$\hat{\mathbf{x}}_q = \frac{\sum_{l=1}^L \alpha_l \mathbf{x}}{\sum_{l=1}^L \alpha_l}. \quad (4.5)$$

Si $q(\mathbf{x}) \neq 0 \ \forall \mathbf{x} : p(\mathbf{x}) \neq 0$, la convergence de l'estimation $\hat{\mathbf{x}}_q$ vers $\hat{\mathbf{x}}$ est assurée. C'est la seule condition sur le choix de q pour que cette méthode fonctionne. Du point de vue pratique, cette méthode souffre de deux défauts pour l'échantillonnage des lois de grande dimension, comme c'est le cas dans cette thèse. La première est le nombre important d'échantillons nécessaires pour avoir une bonne approximation si $q(\mathbf{x})$ n'est pas proche de $p(\mathbf{x})$. La seconde vient des poids de normalisation α_l qui sont d'ordres de grandeur très différents (de l'ordre de $\exp(\sqrt{|\mathbb{N}|})$) (cf. [Mac96]). Ceci rend cette méthode impraticable pour les grandes dimensions.

4.1.2 L'échantillonnage de rejet

Dans cette approche, on cherche à générer des échantillons selon la distribution $p(\mathbf{x})$ en utilisant une loi de proposition $q(\mathbf{x})$. Ensuite, on utilise ces échantillons pour calculer l'estimateur EAP. On choisit une loi q qui couvre la loi p (fig. 4.1) :

$$\exists c : c q'(\mathbf{x}) \geq p'(\mathbf{x}), \forall \mathbf{x}. \quad (4.6)$$

On peut résumer la méthode de la manière suivante :

1. générer un échantillon \mathbf{x}_l selon la loi $q(\mathbf{x})$,
2. générer un échantillon u_l selon une loi uniforme $\mathcal{U}_{[0, c q'(\mathbf{x})]}$,
3. si $u_l > p'(\mathbf{x}_l)$ on rejette l'échantillon, sinon on l'accepte.

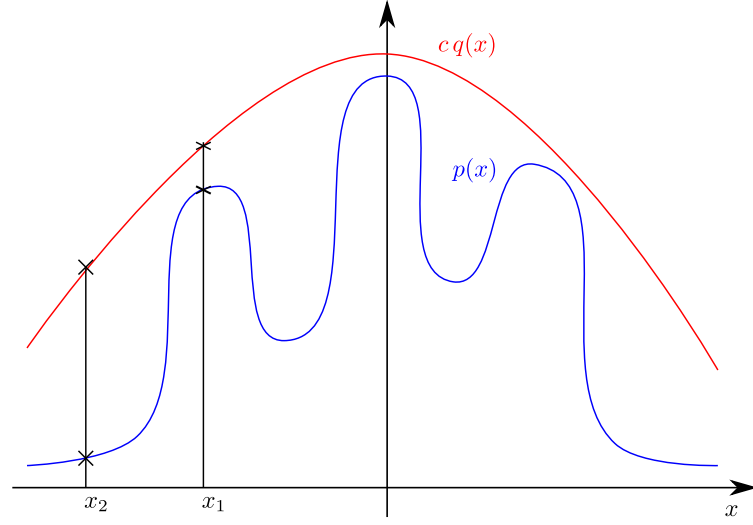


FIGURE 4.1 – Un exemple de l'échantillonnage par rejet en 1D. L'échantillon x_1 a plus de chance d'être accepté et l'échantillon x_2 en a moins.

Ces étapes sont répétées jusqu'à obtenir un nombre suffisant d'échantillons L . Ensuite, l'estimateur EAP est calculé comme suit :

$$\hat{\mathbf{x}} = \frac{1}{L} \sum_{l=1}^L \mathbf{x}_l. \quad (4.7)$$

La difficulté de cette approche est de trouver une loi qui approche bien p , sinon on risque de rejeter beaucoup d'échantillons et le temps de convergence risque d'être très important. En général, le taux de rejet est proportionnel au facteur de normalisation c . Plus q est loin de p , plus le facteur de normalisation c est important. Pratiquement, la constante c augmente exponentiellement avec les dimensions (par exemple, dans le cas 1D, le taux de rejet est le rapport de surface entre p et q , dans le cas 2D, il devient le rapport des volumes,). Ceci rend cette méthode moins adaptée pour les problèmes de grandes dimensions.

4.1.3 L'échantillonnage de Metropolis-Hasting

La difficulté avec les deux approches précédentes est de trouver une distribution de proposition q qui approche bien p afin d'éviter une mauvaise performance pour les problèmes de grandes dimensions. La méthode de Metropolis-Hasting (d'après les travaux de Metropolis [MRR+53] et de Hastings [Has70]), consiste à générer des échantillons \mathbf{x} selon une loi de proposition q conditionnellement à l'échantillon précédent \mathbf{x}_{l-1} (fig. 4.2). Ensuite, on définit le rapport d'acceptation sous la forme :

$$\varphi = \frac{p'(\mathbf{x})}{p'(\mathbf{x}_{l-1})} \frac{q(\mathbf{x}_{l-1}|\mathbf{x})}{q(\mathbf{x}|\mathbf{x}_{l-1})}. \quad (4.8)$$

Si $\varphi > 1$, on accepte l'échantillon et on l'enregistre dans la liste des échantillons $\mathbf{x}_l = \mathbf{x}$. Sinon, on accepte l'échantillon avec une probabilité égale à φ . Si l'échantillon est refusé,

on enregistre l'échantillon précédent dans la liste et on retente l'échantillonnage avec la même densité conditionnelle $q(\mathbf{x}|\mathbf{x}_{l-1})$.

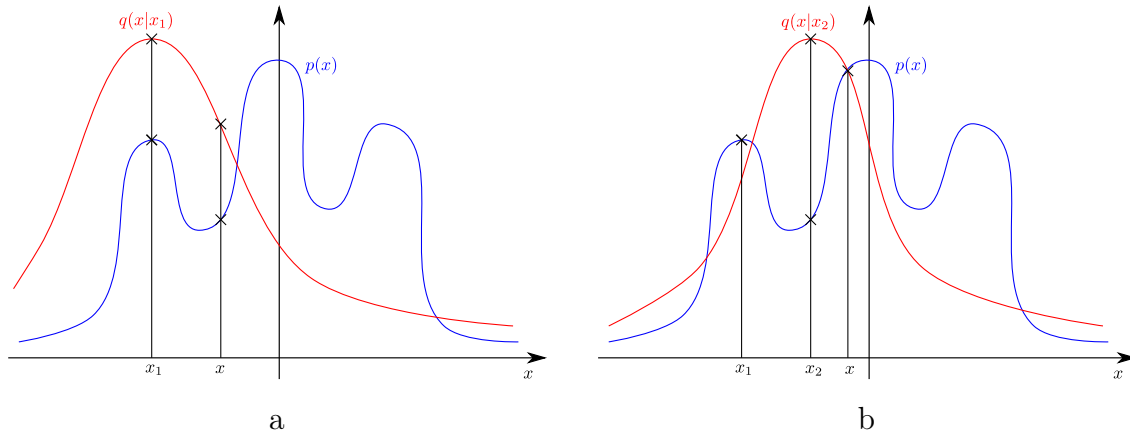


FIGURE 4.2 – Un exemple de l'échantillonnage avec l'algorithme de Metropolis-Hastings en 1D. La loi de proposition est centrée sur l'échantillon précédent : a) la loi de proposition est centrée sur l'échantillon x_1 , b) la loi de proposition est centrée sur l'échantillon x_2 .

La convergence de cette méthode est garantie pour n'importe quelle distribution $q(\mathbf{x}|\mathbf{x}_l) > 0, \forall \mathbf{x}, \mathbf{x}_l$. De ce fait, on n'a pas besoin d'une ressemblance entre les deux distributions q et p , ce qui donne une meilleure performance pour les grandes dimensions. On note deux propriétés pour cet échantillonneur :

1. si q est conditionnellement symétrique (c.à.d. $q(\mathbf{x}_1|\mathbf{x}_2) = q(\mathbf{x}_2|\mathbf{x}_1)$), le rapport d'acceptation se limite seulement au rapport entre les deux probabilités des échantillons $\varphi = \frac{p(\mathbf{x}_2)}{p(\mathbf{x}_1)}$, c'est l'algorithme de Metropolis,
2. cette méthode fait partie des méthodes d'échantillonnage de Monte Carlo par chaînes de Markov (MCMC). A chaque itération, un échantillon est généré en fonction de l'échantillon précédent et les échantillons produits forment une chaîne de Markov. L'inconvénient est que les échantillons sont corrélés et il faut un certain temps (nombre d'échantillons) avant d'obtenir des échantillons décorrés. De plus, ce temps est difficile à estimer.

Cet échantillonneur fonctionne bien pour les distributions de grandes dimensions grâce à sa propriété de génération d'échantillons par chaîne de Markov. Cependant, plus d'échantillons sont nécessaires pour éviter la corrélation introduite par cette chaîne.

4.1.4 L'échantillonnage de Gibbs

L'échantillonneur de Gibbs permet d'obtenir des échantillons d'une loi jointe $p(\mathbf{x}), |\varphi| \geq 2$, à partir d'échantillons tirés suivant les lois conditionnelles. Soit une distribution bi-variée $p(x(1), x(2))$ dont les lois conditionnelles sont $p(x(1)|x(2))$ et $p(x(2)|x(1))$. On suppose que le tirage d'échantillons est facile à partir de ces lois conditionnelles. L'algorithme fonctionne alors comme suit. On tire un échantillon $x_l(1)$ à partir de la loi conditionnelle $p(x(1)|x_{l-1}(2))$. Ensuite, on l'utilise pour obtenir un échantillon $x_l(2)$ suivant la seconde loi conditionnelle $p(x(2)|x_l(1))$ (voir fig. 4.3). Comme dans

l'échantillonneur de Metropolis, on a besoin d'un certain nombre d'échantillons (étape de chauffe) pour obtenir des échantillons décorrélés suivant la loi jointe. Cependant, tous les échantillons générés sont acceptés contrairement à l'échantillonnage de Metropolis-Hastings. La méthode s'étend dans le cas général à N dimensions où la génération de

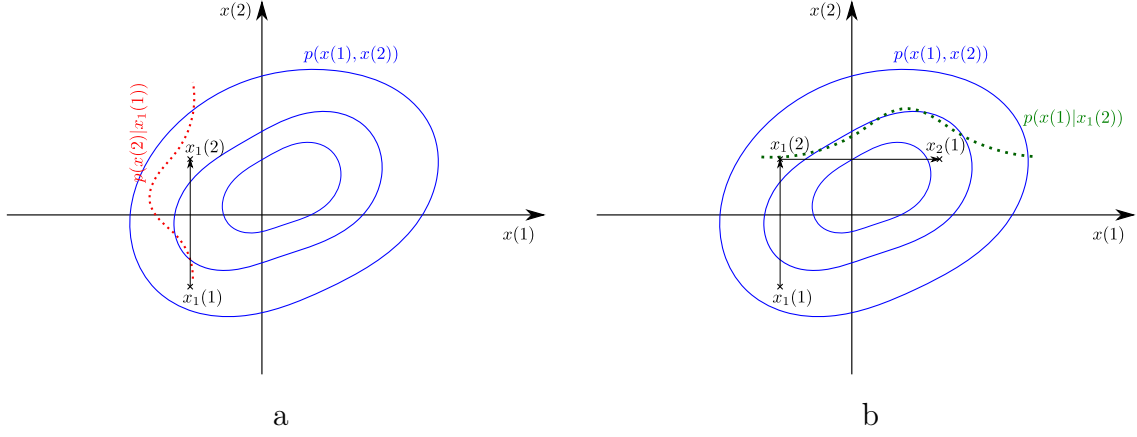


FIGURE 4.3 – Un exemple de l'échantillonnage de Gibbs en dimension 2 : a) le tirage de $x_1(2)$ selon la loi conditionnelle $p(x(2)|x_1(1))$, b) le tirage de $x_2(1)$ selon la loi conditionnelle $p(x(1)|x(2))$

chaque échantillon $\mathbf{x}_l = \{x_l(1), x_l(2), \dots, x_l(N)\}$ nécessite N tirages selon les lois conditionnelles :

$$\begin{cases} p(x(1)|x_{l-1}(2), \dots, x_{l-1}(N)) \\ p(x(2)|x_l(1), x_l(3), \dots, x_{l-1}(N)) \\ \vdots \\ p(x(N)|x_l(1), x_l(2), \dots, x_l(N-1)). \end{cases} \quad (4.9)$$

La convergence des échantillons générés vers ceux de la loi jointe est garantie sous les mêmes conditions que la méthode de Metropolis-Hastings. La méthode de Gibbs permet d'implémenter une méthode d'échantillonnage quand les lois conditionnelles sont faciles à simuler. Cependant, comme pour l'échantillonnage de Metropolis, il est difficile d'estimer le nombre d'échantillons nécessaires pour la convergence et cette convergence est d'autant plus lente que les variables sont corrélées.

On peut considérer la méthode de Gibbs comme un cas particulier de la méthode de Metropolis-Hastings avec des lois de proposition qui correspondent aux lois conditionnelles et un taux d'acceptation égal à un.

4.1.5 L'échantillonnage imbriqué

L'échantillonnage imbriqué (nested sampling) est une nouvelle méthode d'échantillonnage présentée par [Ski04] dans le cadre du calcul bayésien pour l'estimation de l'évidence dans le choix des modèles. Cette méthode permet aussi d'avoir des échantillons selon la loi *a posteriori* comme sous-produits [Ski06]. L'idée est de générer des échantillons de la loi *a priori* sous contrainte de la vraisemblance. Prenons la distribution

a posteriori $p(\mathbf{x}|\mathbf{y}; \mathcal{M})$ définie par :

$$p(\mathbf{x}|\mathbf{y}; \mathcal{M}) = \frac{p(\mathbf{y}|\mathbf{x}; \mathcal{M})p(\mathbf{x}|\mathcal{M})}{p(\mathbf{y}|\mathcal{M})}, \quad (4.10)$$

avec l'évidence $p(\mathbf{y}|\mathcal{M}) = \int_{\mathbb{R}^n} p(\mathbf{x}|\mathcal{M})p(\mathbf{y}|\mathbf{x}; \mathcal{M})d\mathbf{x}$. On définit $\varpi(L)$, le poids de l'*a priori* pour lequel la vraisemblance $\mathcal{L}(\mathbf{x}) = p(\mathbf{y}|\mathbf{x})$ est supérieure à un certain niveau L :

$$\varpi(L) = \int_{\Omega_L} p(\mathbf{x}|\mathcal{M})d\mathbf{x} : \quad \Omega_L = \{\mathbf{x} : \mathcal{L}(\mathbf{x}) \geq L\}. \quad (4.11)$$

La réalisation simple de l'algorithme consiste à tirer un échantillon initial de la loi *a priori* \mathbf{x}_1 . Ensuite pour une itération l , on échantillonne la loi *a priori* modifiée $\hat{p}_l(\mathbf{x})$ par la vraisemblance à l'échantillon précédent \mathbf{x}_{l-1} :

$$\hat{p}_l(\mathbf{x}) = \begin{cases} p(\mathbf{x}|\mathcal{M}) & \text{si } \mathcal{L}(\mathbf{x}) > \mathcal{L}(\mathbf{x}_{l-1}) \\ 0 & \text{sinon.} \end{cases} \quad (4.12)$$

Après avoir obtenu L échantillons, l'évidence du modèle peut être calculée en approchant l'intégrale $p(\mathbf{y}|\mathcal{M}) = \int_0^1 \mathcal{L}(x(\varpi))d\varpi$ d'une manière numérique comme illustré par la figure 4.4.b.

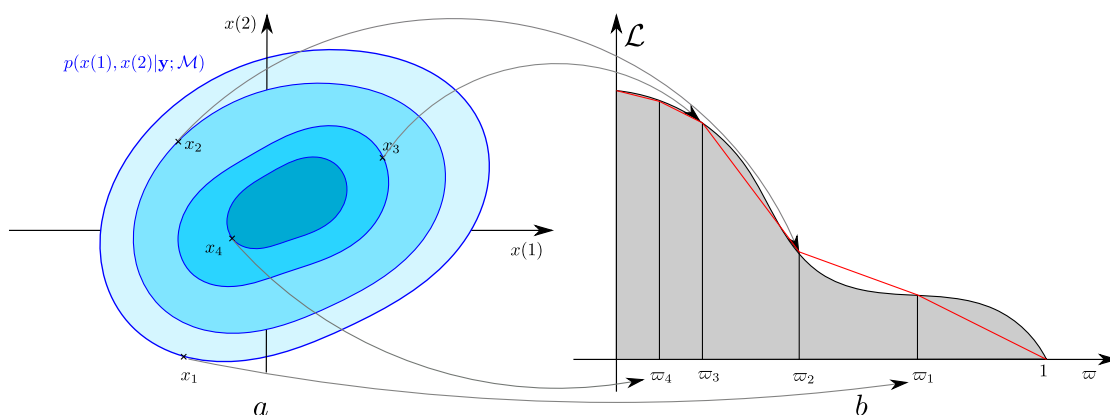


FIGURE 4.4 – Un exemple de l'échantillonnage imbriqué en $2D$: a) les niveaux de vraisemblance dans le domaine des variables, b) la distribution de la vraisemblance en fonction du poids *a priori* ϖ

En pratique, on tire plusieurs échantillons pour un niveau de vraisemblance donné puis on choisit la vraisemblance minimale de ces échantillons comme seuil pour le tirage d'après. Ceci permet d'obtenir une meilleure qualité d'approximation. Cet algorithme nécessite l'échantillonnage de la loi *a priori* sous la contrainte de la vraisemblance, ce qui peut-être obtenu par un des échantillonneurs proposés précédemment (rejet, Metropolis-Hastings, ...).

4.2 Choix de la méthode d'échantillonnage

Dans cette thèse, nous travaillons dans un espace de grande dimension $|\alpha| = \mathcal{O}(N)$, ce qui rend les deux premières méthodes difficiles à cause de leurs problèmes déjà évoqués

pour les grandes dimensions. En plus, la complexité de la méthode d'échantillonnage imbriqué prend un temps très important. Comme les lois conditionnelles sont accessibles dans notre cas, nous optons pour l'échantillonnage de Gibbs pour établir l'estimateur *a posteriori* (taux d'acceptation égal à un par rapport à un échantillonneur de Metropolis-Hastings). Nous présentons, dans ce qui suit, les expressions des lois conditionnelles nécessaires pour l'obtention des échantillons *a posteriori* en discutant plusieurs points de mise en œuvre.

4.3 Gibbs pour le modèle linéaire (gbLMGI-gbLMGM)

Nous présentons dans cette partie l'approximation de la loi *a posteriori* dans le cas du modèle linéaire. Nous avons choisi un échantillonneur de Gibbs car les lois conditionnelles sont faciles à simuler grâce au choix de lois *a priori* conjuguées. Pour obtenir des échantillons suivant la loi *a posteriori* jointe $p(\mathbf{x}, \mathbf{z}, \boldsymbol{\psi} | \mathbf{y})$ (eq. 3.35), on utilise l'échantillonnage de Gibbs pour tirer les échantillons suivant les trois lois conditionnelles :

$$\begin{cases} p(\mathbf{x} | \mathbf{y}, \mathbf{z}, \boldsymbol{\psi}) \\ p(\mathbf{z} | \mathbf{y}, \mathbf{x}, \boldsymbol{\psi}) \\ p(\boldsymbol{\psi} | \mathbf{y}, \mathbf{x}, \mathbf{z}) \end{cases} . \quad (4.13)$$

On présente, dans la partie qui suit, les expressions des lois conditionnelles. Nous rappelons que les grandeurs avec un chapeau ($\hat{\mathbf{m}}, \hat{\mathbf{V}}, \dots$) sont les paramètres de forme des lois *a posteriori* conditionnelles.

4.3.1 Contraste \mathbf{x}

On écrit la loi conditionnelle de \mathbf{x} sous la forme :

$$p(\mathbf{x} | \mathbf{y}, \mathbf{z}, \boldsymbol{\psi}) \propto p(\mathbf{y} | \mathbf{x}, \rho_\epsilon) p(\mathbf{x} | \mathbf{z}, \boldsymbol{\eta}, \boldsymbol{\rho}). \quad (4.14)$$

Comme la vraisemblance $p(\mathbf{y} | \mathbf{x}, \rho_\epsilon)$ et l'*a priori* conditionnel $p(\mathbf{x} | \mathbf{z}, \boldsymbol{\eta}, \boldsymbol{\rho})$ sont des gaussiennes, la loi *a posteriori* conditionnelle sera aussi gaussienne :

$$p(\mathbf{x} | \mathbf{y}, \mathbf{z}, \boldsymbol{\psi}) = \mathcal{N}(\hat{\mathbf{m}}_x, \hat{\mathbf{V}}_x), \quad (4.15)$$

avec

$$\hat{\mathbf{V}}_x = (\rho_\epsilon^{-1} \mathbf{H}^t \mathbf{H} + \mathbf{V}_x^{-1})^{-1}, \quad (4.16)$$

$$\hat{\mathbf{m}}_x = \hat{\mathbf{V}}_x (\rho_\epsilon^{-1} \mathbf{H}^t \mathbf{y} + \mathbf{V}_x^{-1} \mathbf{m}_x), \quad (4.17)$$

où les expressions de \mathbf{m}_x et \mathbf{V}_x sont données par les équations 3.14 et 3.20.

L'échantillonnage de cette loi nécessite de générer des échantillons selon une loi gaussienne multivariée avec une matrice de covariance $\hat{\mathbf{V}}$ peu facilement diagonalisable à cause de la matrice de projection \mathbf{H} . Nous présenterons une méthode pratique pour générer des échantillons à partir de ce type de lois dans la partie sur la mise en œuvre (4.5).

4.3.2 Champ caché \mathbf{z}

Pour écrire la loi *a posteriori* conditionnelle de \mathbf{z} sachant l'objet \mathbf{x} et les autres hyper-paramètres, on utilise la règle de Bayes :

$$p(\mathbf{z} = \boldsymbol{\kappa} | \mathbf{x}, \mathbf{y}, \boldsymbol{\psi}) \propto p(\mathbf{x} | \mathbf{z} = \boldsymbol{\kappa}, \boldsymbol{\eta}, \boldsymbol{\rho}) p(\mathbf{z} = \boldsymbol{\kappa} | \Upsilon). \quad (4.18)$$

Comme l'*a priori* est un champ de Potts, la loi *a posteriori* conditionnelle est un champ de Potts avec un champ externe dû à la vraisemblance de l'objet \mathbf{x} . Elle s'écrit sous la forme suivante :

$$\begin{aligned} p(\mathbf{z} = \boldsymbol{\kappa} | \mathbf{x}, \boldsymbol{\psi}) &\propto \exp \left(-\frac{1}{2} (\mathbf{x} - \mathbf{m}_x)^t \mathbf{V}_x^{-1} (\mathbf{x} - \mathbf{m}_x) + \Upsilon \sum_{\mathbf{r}} \sum_{\mathbf{r}' \in \mathcal{V}(\mathbf{r})} \delta(\kappa(\mathbf{r}) - \kappa(\mathbf{r}')) \right) \\ &\propto \exp \left(-\frac{\sum_{\mathbf{r}} \mathcal{C}(\mathbf{r}) |x(\mathbf{r}) - \eta_{\kappa}|^2 + \frac{(1-\mathcal{C}(\mathbf{r}))}{2N_V} \sum_{\mathbf{r}' \in \mathcal{V}(\mathbf{r})} |x(\mathbf{r}) - x(\mathbf{r}')|^2}{2\rho_{\kappa}} + \right. \\ &\quad \left. \Upsilon \sum_{\mathbf{r}} \sum_{\mathbf{r}' \in \mathcal{V}(\mathbf{r})} \delta(\kappa(\mathbf{r}) - \kappa(\mathbf{r}')) \right), \end{aligned} \quad (4.19)$$

où $\mathcal{C}(\mathbf{r})$ est la variable de contour :

$$\mathcal{C}(\mathbf{r}) = \begin{cases} 1 & \text{modèle MGI} \\ 1 - \prod_{\mathbf{r}' \in \mathcal{V}(\mathbf{r})} \delta(\kappa(\mathbf{r}') - \kappa(\mathbf{r})) & \text{modèle MGM.} \end{cases} \quad (4.20)$$

L'échantillonnage suivant cette loi n'est pas direct et il faut utiliser une méthode d'échantillonnage MCMC. Nous présenterons, dans la partie sur la mise en œuvre (4.5), une méthode d'échantillonnage du champ de Potts fondée sur l'échantillonneur de Gibbs.

4.3.3 Hyper-paramètres $\boldsymbol{\psi}$

Pour les hyper-paramètres, les lois *a posteriori* sont dans la même famille que les lois *a priori* grâce au choix de lois conjuguées. On donne dans ce qui suit les expressions des ces lois conditionnelles.

Variance du bruit

$$\begin{aligned} p(\rho_{\epsilon} | \mathbf{x}, \mathbf{y}) &\propto p(\mathbf{y} | \mathbf{x}, \rho_{\epsilon}) p(\rho_{\epsilon}) \\ &= \mathcal{IG}(\hat{\gamma}_{\epsilon}, \hat{\phi}_{\epsilon}), \end{aligned} \quad (4.21)$$

où

$$\hat{\phi}_{\epsilon} = \phi_{\epsilon} + \frac{M}{2}, \quad (4.22)$$

$$\hat{\gamma}_{\epsilon} = \gamma_{\epsilon} + \frac{\|\mathbf{y} - \mathbf{H}\mathbf{x}\|_2^2}{2}. \quad (4.23)$$

Variances des classes

$$\begin{aligned} \forall \kappa \in \{1, \dots, K\}, \quad p(\rho_\kappa | \mathbf{x}, \mathbf{z}, \eta_\kappa) &\propto p(\mathbf{x} | \mathbf{z}, \rho_\kappa, \eta_\kappa) p(\rho_\kappa | \gamma_0, \phi_0) \\ &= \mathcal{IG}(\hat{\gamma}_\kappa, \hat{\phi}_\kappa), \end{aligned} \quad (4.24)$$

avec

$$\hat{\phi}_\kappa = \phi_0 + \frac{N_\kappa}{2}, \quad (4.25)$$

$$\hat{\gamma}_\kappa = \gamma_0 + \frac{\sum_{\mathbf{r}} \mathcal{C}_\kappa(\mathbf{r}) |x(\mathbf{r}) - \eta_\kappa|^2 + \frac{(1 - \mathcal{C}_\kappa(\mathbf{r}))}{2N_\kappa} \sum_{\mathbf{r}' \in \mathcal{V}(\mathbf{r})} |x(\mathbf{r}) - x(\mathbf{r}')|^2}{2}, \quad (4.26)$$

N_κ est le nombre de pixels dans la classe κ et

$$\mathcal{C}_\kappa(\mathbf{r}) = \begin{cases} 1 & \text{modèle MGI} \\ 1 - \prod_{\mathbf{r}' \in \mathcal{V}(\mathbf{r})} \delta(z(\mathbf{r}') - \kappa) & \text{modèle MGM.} \end{cases} \quad (4.27)$$

Moyennes des classes

$$\begin{aligned} \forall \kappa \in \{1, \dots, K\}, \quad p(\eta_\kappa | \mathbf{x}, \rho_\kappa, \mathbf{z}) &\propto p(\mathbf{x} | \mathbf{z}, \eta_\kappa, \rho_\kappa) p(\eta_\kappa | \eta_0, \tau_0) \\ &= \mathcal{N}(\hat{\eta}_\kappa, \hat{\tau}_\kappa), \end{aligned} \quad (4.28)$$

où

$$\hat{\tau}_\kappa = \left(\frac{\sum_{\mathbf{r} \in \mathcal{R}_\kappa} \mathcal{C}(\mathbf{r})}{\rho_\kappa} + \tau_0^{-1} \right)^{-1}, \quad (4.29)$$

$$\hat{\eta}_\kappa = \hat{\tau}_\kappa \left(\frac{\sum_{\mathbf{r} \in \mathcal{R}_\kappa} \mathcal{C}(\mathbf{r}) x(\mathbf{r})}{\rho_\kappa} + \frac{\eta_0}{\tau_0} \right), \quad (4.30)$$

avec $\mathcal{R}_\kappa = \{\mathbf{r} : z(\mathbf{r}) = \kappa\}$.

4.4 Gibbs pour le modèle non linéaire (gbCSMGI-gbCSMGM)

Comme dans le cas du modèle linéaire, nous avons adopté une approche fondée sur l'échantillonnage de Gibbs pour l'approximation de la loi *a posteriori* dans le cas de l'imagerie de diffraction. On utilise les lois *a posteriori* conditionnelles des courants \mathbf{w} , du contraste \mathbf{x} , du champ caché \mathbf{z} et des hyper-paramètres $\boldsymbol{\psi}$ afin de générer des échantillons selon la loi *a posteriori* jointe $p(\mathbf{w}, \mathbf{x}, \mathbf{z}, \boldsymbol{\psi} | \mathbf{y})$ (eq. 3.36). Dans ce qui suit, on donnera les expressions des lois conditionnelles :

$$\begin{cases} p(\mathbf{w} | \mathbf{y}, \mathbf{x}, \mathbf{z}, \boldsymbol{\psi}) \\ p(\mathbf{x} | \mathbf{w}, \mathbf{z}, \boldsymbol{\psi}) \\ p(\mathbf{z} | \mathbf{y}, \mathbf{x}, \boldsymbol{\psi}) \\ p(\boldsymbol{\psi} | \mathbf{y}, \mathbf{w}, \mathbf{x}, \mathbf{z}), \end{cases} \quad (4.31)$$

puis on discutera de la mise en œuvre dans la partie suivante (4.5).

4.4.1 Courants \mathbf{w}

On donne la loi *a posteriori* des courants \mathbf{w} sous la forme :

$$p(\mathbf{w}|\mathbf{y}, \mathbf{x}, \boldsymbol{\psi}) \propto p(\mathbf{y}|\mathbf{w}, \rho_\epsilon) p(\mathbf{w}|\mathbf{x}, \rho_\xi). \quad (4.32)$$

Comme les deux termes $p(\mathbf{y}|\mathbf{w}, \rho_\epsilon)$ et $p(\mathbf{w}|\mathbf{x}, \rho_\xi)$ sont gaussiens, la loi conditionnelle sera aussi gaussienne :

$$p(\mathbf{w}|\mathbf{y}, \mathbf{x}, \rho_\epsilon, \rho_\xi) = \mathcal{N}(\hat{\mathbf{m}}_w, \hat{\mathbf{V}}_w), \quad (4.33)$$

avec

$$\hat{\mathbf{V}}_w = \left(\rho_\epsilon^{-1} \mathbf{G}^{oH} \mathbf{G}^o + \rho_\xi^{-1} (\mathbf{I} - 2\Re(\mathbf{X}\mathbf{G}^c) + \mathbf{G}^{cH} \mathbf{X}^H \mathbf{X} \mathbf{G}^c) \right)^{-1} \quad (4.34)$$

$$\hat{\mathbf{m}}_w = \hat{\mathbf{V}}_w \left(\rho_\epsilon^{-1} \mathbf{G}^{oH} \mathbf{y} + \rho_\xi^{-1} (\mathbf{I} - \mathbf{G}^{cH} \mathbf{X}^H) \mathbf{E}^o \right). \quad (4.35)$$

L'échantillonnage selon cette gaussienne multivariée se fait d'une manière semblable à l'échantillonnage du contraste dans le cas linéaire et il sera décrit dans la partie sur la mise en œuvre (4.5).

4.4.2 Contraste \mathbf{x}

On écrit la loi *a posteriori* conditionnelle du contraste sous la forme :

$$\begin{aligned} p(\mathbf{x}|\mathbf{w}, \mathbf{z}, \rho_\xi, \boldsymbol{\rho}, \boldsymbol{\eta}) &\propto p(\mathbf{w}|\mathbf{x}, \rho_\xi) p(\mathbf{x}|\mathbf{z}, \boldsymbol{\rho}, \boldsymbol{\eta}) \\ &= \mathcal{N}(\hat{\mathbf{m}}_x, \hat{\mathbf{V}}_x), \end{aligned} \quad (4.36)$$

avec

$$\hat{\mathbf{V}}_x = (\rho_\xi^{-1} \mathbf{Diag}(\mathbf{E}^2) + \mathbf{V}_x^{-1})^{-1}, \quad (4.37)$$

$$\hat{\mathbf{m}}_x = \hat{\mathbf{V}}_x (\mathbf{E}^* \circ \mathbf{w} + \mathbf{V}_x^{-1} \mathbf{m}_x), \quad (4.38)$$

où les expressions de \mathbf{m}_x et \mathbf{V}_x sont données par les équations 3.14 et 3.20.

4.4.3 Champ caché \mathbf{z}

Comme dans le cas linéaire, la loi *a posteriori* conditionnelle du champ caché \mathbf{z} est un champ de Potts avec partie externe :

$$p(\mathbf{z} = \boldsymbol{\kappa}|\mathbf{x}, \mathbf{y}, \boldsymbol{\psi}) \propto p(\mathbf{x}|\mathbf{z}, \boldsymbol{\eta}, \boldsymbol{\rho}) p(\mathbf{z}|\Upsilon),$$

$$\begin{aligned} p(\mathbf{z} = \boldsymbol{\kappa}|\mathbf{x}, \boldsymbol{\psi}) &\propto \exp \left(-\frac{1}{2} (\mathbf{x} - \mathbf{m}_x)^t \mathbf{V}_x^{-1} (\mathbf{x} - \mathbf{m}_x) + \Upsilon \sum_{\mathbf{r}} \sum_{\mathbf{r}' \in \mathcal{V}(\mathbf{r})} \delta(\kappa(\mathbf{r}) - \kappa(\mathbf{r}')) \right) \\ &\propto \exp \left(-\frac{\sum_{\mathbf{r}} \mathcal{C}(\mathbf{r}) |x(\mathbf{r}) - \eta_\kappa|^2 + \frac{(1-\mathcal{C}(\mathbf{r}))}{2N_V} \sum_{\mathbf{r}' \in \mathcal{V}(\mathbf{r})} |x(\mathbf{r}) - x(\mathbf{r}')|^2}{2\rho_\kappa} + \right. \\ &\quad \left. \Upsilon \sum_{\mathbf{r}} \sum_{\mathbf{r}' \in \mathcal{V}(\mathbf{r})} \delta(\kappa(\mathbf{r}) - \kappa(\mathbf{r}')) \right). \end{aligned} \quad (4.39)$$

On utilise, pour cette loi, un échantillonneur de Gibbs qui sera décrit dans la partie sur la mise en œuvre (4.5).

4.4.4 Hyper-paramètres ψ

On donne dans ce qui suit les expressions des lois *a posteriori* conditionnelles des hyper-paramètres ψ .

Variances du bruit ρ_ϵ

$$\begin{aligned} p(\rho_\epsilon | \mathbf{w}, \mathbf{y}) &\propto p(\mathbf{y} | \mathbf{w}, \rho_\epsilon) p(\rho_\epsilon) \\ &= \mathcal{IG}(\hat{\gamma}_\epsilon, \hat{\phi}_\epsilon), \end{aligned} \quad (4.40)$$

où

$$\hat{\phi}_\epsilon = \phi_\epsilon + \frac{M}{2}, \quad (4.41)$$

$$\hat{\gamma}_\epsilon = \gamma_\epsilon + \frac{\|\mathbf{y} - \mathbf{G}^o \mathbf{w}\|_2^2}{2}, \quad (4.42)$$

et

$$\begin{aligned} p(\rho_\xi | \mathbf{w}, \mathbf{x}) &\propto p(\mathbf{w} | \mathbf{x}, \rho_\xi) p(\rho_\xi) \\ &= \mathcal{IG}(\hat{\gamma}_\xi, \hat{\phi}_\xi), \end{aligned} \quad (4.43)$$

où

$$\hat{\phi}_\xi = \phi_\xi + \frac{N \times N_P \times N_f \times N_v}{2}, \quad (4.44)$$

$$\hat{\gamma}_\xi = \gamma_\xi + \frac{\|\mathbf{w} - \mathbf{X}\mathbf{E}\|_2^2}{2}. \quad (4.45)$$

Variances des classes ρ

$$\begin{aligned} \forall \kappa \in \{1, \dots, K\}, \quad p(\rho_\kappa | \mathbf{x}, \mathbf{z}, \eta_\kappa) &\propto p(\mathbf{x} | \mathbf{z}, \rho_\kappa, \eta_\kappa) p(\rho_\kappa | \gamma_0, \phi_0) \\ &= \mathcal{IG}(\hat{\gamma}_\kappa, \hat{\phi}_\kappa), \end{aligned} \quad (4.46)$$

avec

$$\hat{\phi}_\kappa = \phi_0 + \frac{N_\kappa}{2}, \quad (4.47)$$

$$\hat{\gamma}_\kappa = \gamma_0 + \frac{\sum_{\mathbf{r}} \mathcal{C}_\kappa(\mathbf{r}) |x(\mathbf{r}) - \eta_\kappa|^2 + \frac{(1 - \mathcal{C}_\kappa(\mathbf{r}))}{2N_\mathcal{V}} \sum_{\mathbf{r}' \in \mathcal{V}(\mathbf{r})} |x(\mathbf{r}) - x(\mathbf{r}')|^2}{2}. \quad (4.48)$$

Moyennes des classes η

$$\forall \kappa \in \{1, \dots, K\}, \quad p(\eta_\kappa | \mathbf{x}, \rho_\kappa, \mathbf{z}) \propto p(\mathbf{x} | \mathbf{z}, \eta_\kappa, \rho_\kappa) p(\eta_\kappa | \eta_0, \tau_0) = \mathcal{N}(\hat{\eta}_\kappa, \hat{\tau}_\kappa), \quad (4.49)$$

où

$$\hat{\tau}_\kappa = \left(\frac{\sum_{\mathbf{r} \in \mathcal{R}_\kappa} \mathcal{C}(\mathbf{r})}{\rho_\kappa} + \tau_0^{-1} \right)^{-1}, \quad (4.50)$$

$$\hat{\eta}_\kappa = \hat{\tau}_\kappa \left(\frac{\sum_{\mathbf{r} \in \mathcal{R}_\kappa} \mathcal{C}(\mathbf{r}) x(\mathbf{r})}{\rho_\kappa} + \frac{\eta_0}{\tau_0} \right). \quad (4.51)$$

4.5 Mise en œuvre des échantillonneurs

L'algorithme d'échantillonnage consiste à tirer des échantillons des lois conditionnelles afin d'obtenir des échantillons de la loi jointe et cette opération est répétée pendant plusieurs itérations. Les premiers échantillons tirés ne sont pas pris en compte à cause de l'étape dite "de chauffe". Les échantillons d'après sont utilisés pour calculer l'estimateur EAP numériquement. Pour résumer, à partir de l'itération $l - 1$ on génère les échantillons de l'étape l (dans le cas linéaire) comme suit :

1. tirer \mathbf{x}^l à partir de $p(\mathbf{x} | \mathbf{y}, \mathbf{z}^{l-1}, \rho_\epsilon^{l-1}, \boldsymbol{\rho}^{l-1}, \boldsymbol{\eta}^{l-1})$ définie dans eq. 4.15,
2. tirer \mathbf{z}^l à partir de $p(\mathbf{z} | \mathbf{x}^l, \boldsymbol{\rho}^{l-1}, \boldsymbol{\eta}^{l-1})$ définie dans eq. 4.19,
3. tirer ρ_ϵ^l à partir de $p(\rho_\epsilon | \mathbf{y}, \mathbf{x}^l)$ définie dans eq. 4.21,
4. tirer ρ_κ^l à partir de $p(\rho_\kappa | \mathbf{x}^l, \mathbf{z}^l, \boldsymbol{\eta}^{l-1})$, $\forall \kappa$, définie dans eq. 4.24,
5. tirer η_κ^l à partir de $p(\eta_\kappa | \mathbf{x}^l, \mathbf{z}^l, \boldsymbol{\rho}^l)$, $\forall \kappa$, définie dans eq. 4.28,

et dans le cas non-linéaire, on a,

1. tirer \mathbf{w}^l à partir de $p(\mathbf{w} | \mathbf{y}, \mathbf{x}^{l-1}, \rho_\epsilon^{l-1}, \rho_\xi^{l-1})$ définie dans eq. 4.33,
2. tirer \mathbf{x}^l à partir de $p(\mathbf{x} | \mathbf{w}^l, \mathbf{z}^{l-1}, \rho_\xi^{l-1}, \boldsymbol{\rho}^{l-1}, \boldsymbol{\eta}^{l-1})$ définie dans eq. 4.36,
3. tirer \mathbf{z}^l à partir de $p(\mathbf{z} | \mathbf{x}^l, \boldsymbol{\rho}^{l-1}, \boldsymbol{\eta}^{l-1})$ définie dans eq. 4.39,
4. tirer ρ_ϵ^l à partir de $p(\rho_\epsilon | \mathbf{y}, \mathbf{w}^l)$ définie dans eq. 4.40,
5. tirer ρ_ξ^l à partir de $p(\rho_\xi | \mathbf{x}^l, \mathbf{w}^l)$ définie dans eq. 4.43,
6. tirer ρ_κ^l à partir de $p(\rho_\kappa | \mathbf{x}^l, \mathbf{z}^l, \boldsymbol{\eta}^{l-1})$, $\forall \kappa$, définie dans eq. 4.46,
7. tirer η_κ^l à partir de $p(\eta_\kappa | \mathbf{x}^l, \mathbf{z}^l, \boldsymbol{\rho}^l)$, $\forall \kappa$, définie dans eq. 4.49.

Du point de vue pratique, l'échantillonnage de \mathbf{w} et \mathbf{x} nécessite un tirage selon une loi gaussienne multivariée. On propose pour cela une méthode fondée sur une optimisation du critère. Pour le champ caché, on propose un échantillonneur de Gibbs et les hyperparamètres nécessitent des tirages selon des lois monodimensionnelles (gaussienne et inverse gamma) qui sont faciles à obtenir.

4.5.1 Échantillonnage d'une loi gaussienne multivariée

On présente ici le principe d'échantillonnage d'une loi gaussienne multivariée par optimisation du critère ([FOG10]). On présente la méthode pour le contraste dans le cas linéaire, mais cette méthode est aussi applicable pour les autres variables gaussiennes. Prenons la loi *a posteriori* conditionnelle du contraste :

$$\begin{aligned} p(\mathbf{x}|\mathbf{y}, \mathbf{z}, \boldsymbol{\psi}) &\propto p(\mathbf{y}|\mathbf{x}, \rho_\epsilon) p(\mathbf{x}|\mathbf{z}, \boldsymbol{\eta}, \boldsymbol{\rho}), \\ p(\mathbf{x}|\mathbf{y}, \mathbf{z}, \boldsymbol{\psi}) &= \mathcal{N}(\hat{\mathbf{m}}_x, \hat{\mathbf{V}}_x), \end{aligned} \quad (4.52)$$

avec

$$\hat{\mathbf{V}}_x = (\rho_\epsilon^{-1} \mathbf{H}^t \mathbf{H} + \mathbf{V}_x^{-1})^{-1}, \quad (4.53)$$

$$\hat{\mathbf{m}}_x = \hat{\mathbf{V}}_x (\rho_\epsilon^{-1} \mathbf{H}^t \mathbf{y} + \mathbf{V}_x^{-1} \mathbf{m}_x). \quad (4.54)$$

La moyenne *a posteriori* $\hat{\mathbf{m}}_x$ peut-être obtenue par optimisation de critère puisqu'elle correspond au maximum *a posteriori* :

$$\begin{aligned} \hat{\mathbf{m}}_x &= \arg \max_{\mathbf{x}} (p(\mathbf{x}|\mathbf{y}, \mathbf{z}, \boldsymbol{\psi})) = \arg \min_{\mathbf{x}} (\mathcal{J}(\mathbf{x}|\mathbf{y}, \mathbf{m}_x)) \\ \mathcal{J}(\mathbf{x}|\mathbf{y}, \mathbf{m}_x) &= \rho_\epsilon^{-1} \|\mathbf{y} - \mathbf{H}\mathbf{x}\|_2^2 + (\mathbf{x} - \mathbf{m}_x)^t \mathbf{V}_x^{-1} (\mathbf{x} - \mathbf{m}_x). \end{aligned} \quad (4.55)$$

L'idée de l'échantillonnage est de perturber les données \mathbf{y} et la moyenne *a priori* \mathbf{m}_x avec des variables gaussiennes centrées :

$$\mathring{\mathbf{y}} = \mathbf{y} + \iota_y, \quad (4.56)$$

$$\mathring{\mathbf{m}}_x = \mathbf{m}_x + \iota_x, \quad (4.57)$$

puis d'optimiser $\mathcal{J}(\mathbf{x})$ pour obtenir un échantillon \mathbf{x}^l :

$$\mathbf{x}^l = \arg \min_{\mathbf{x}} (\mathcal{J}(\mathbf{x})), \quad (4.58)$$

où ι_y et ι_x sont tirés suivant les lois gaussiennes $\mathcal{N}(\mathbf{0}, \rho_\epsilon \mathbf{I})$ et $\mathcal{N}(\mathbf{0}, \mathbf{V}_x)$.

4.5.2 Échantillonnage d'une loi de Potts

L'algorithme d'échantillonnage selon le champ de Potts consiste à séparer les éléments du champ en deux ensembles \mathbf{z}_B et \mathbf{z}_N (fig. 4.5). Ensuite, on applique l'algorithme d'échantillonnage de Gibbs avec deux lois conditionnelles :

$$\begin{cases} p(\mathbf{z}_B|\mathbf{z}_N) \\ p(\mathbf{z}_N|\mathbf{z}_B) \end{cases}. \quad (4.59)$$

L'échantillonnage selon chaque loi conditionnelle peut-être facilement obtenu grâce à l'indépendance entre les éléments de chaque ensemble. Ceci est dû au choix des voisins les plus proches dans le modèle *a priori*.

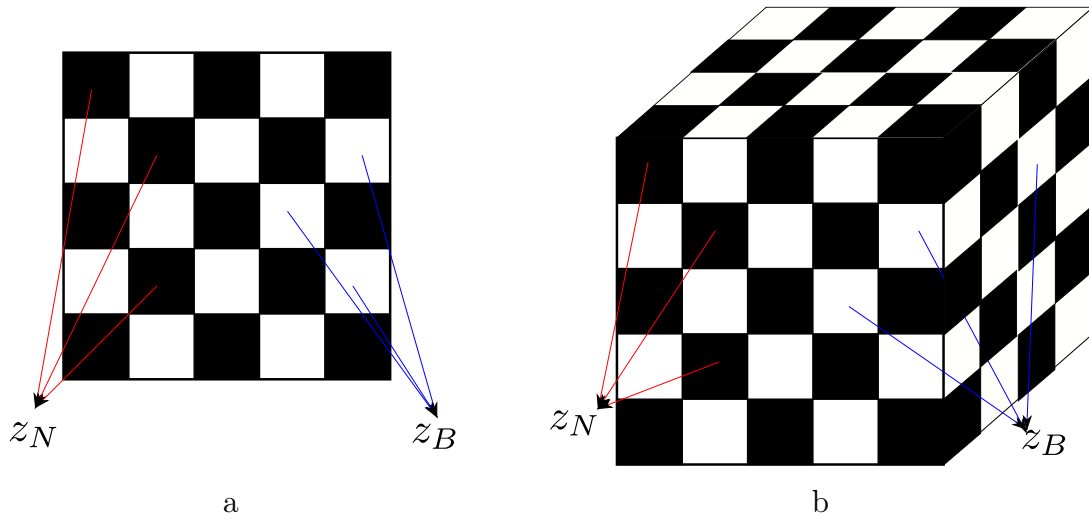


FIGURE 4.5 – La séparation en deux ensembles (noir et blanc) pour le champ caché : a) le champ 2D, b) le champ 3D

4.6 Discussion

L'approche d'échantillonnage stochastique pour le calcul bayésien a été présentée dans ce chapitre. Comme les lois conditionnelles *a posteriori* sont simulables, nous avons choisi la technique d'échantillonnage de Gibbs. Les expressions de ces lois sont obtenues et le schéma de leur mise en œuvre est donné. Du point de vue pratique, les étapes d'échantillonnage du contraste \mathbf{x} et des courants \mathbf{w} sont coûteuses, car elles nécessitent l'échantillonnage de lois gaussiennes de grande dimension avec une matrice de covariance non diagonalisable dans le domaine de Fourier. Par exemple pour reconstruire une image (512×32), l'algorithme *gbCSMGI* prend 3h comme on verra dans le paragraphe 6.4.2.

Dans le chapitre qui suit, nous présentons la deuxième approche de calcul bayésien étudiée dans cette thèse : l'approche bayésienne variationnelle. Cette méthode approche la loi *a posteriori* par une loi séparable d'une manière analytique, ce qui permet de réduire le problème de temps de calcul lié à l'approche d'échantillonnage présentée dans ce chapitre.

5

L'approche bayésienne variationnelle

5.1 Introduction

Une des difficultés de l'approche numérique dans le cadre bayésien est le temps nécessaire à l'obtention d'échantillons selon la loi *a posteriori*. De plus, ce temps augmente rapidement avec la dimension de l'espace, ce qui rend cette solution non utilisable en grande dimension. Une deuxième méthode d'approximation consiste à trouver une loi analytique approchant la loi *a posteriori* et à l'utiliser pour obtenir les estimateurs.

Récemment, une approximation déterministe de la loi *a posteriori*, appelée approximation bayésienne variationnelle (apprentissage dans un ensemble) a été introduite (cf. [SQ06] pour une étude approfondie sur cette méthode). L'idée est d'approcher la loi jointe par une loi séparable avec une forme libre. La forme de cette loi approchante est obtenue en minimisant la distance de Kullback-Leibler. Le choix de séparation doit rendre ce calcul plus facile car une des difficultés principales réside dans la dépendance *a posteriori* entre les paramètres recherchés.

Cette méthode a d'abord été introduite dans le domaine de l'inférence bayésienne pour des applications en réseaux de neurones [HvC93, Mac95], puis pour l'apprentissage des modèles graphiques [JGJS99] et l'estimation des paramètres des modèles [JJ00]. Son apparition dans le domaine des problèmes inverses est relativement récente avec une première application en restauration d'image [LG04], puis dans les problèmes de séparation de sources [Cho02] et [KRI10], et dans les problèmes d'imagerie hyperspectrale [BMD08].

5.1.1 Principe de l'approche variationnelle

Nous présentons le principe de l'approche variationnelle dans le cadre du problème linéaire, mais le même principe s'applique au cas bilinéaire. Rappelons les expressions

des lois *a posteriori* :

$$p(\mathbf{x}, \mathbf{z}, \boldsymbol{\psi} | \mathbf{y}; \mathcal{M}) = \frac{p(\mathbf{y} | \mathbf{x}, \mathbf{z}, \rho_\epsilon; \mathcal{M}) p(\mathbf{x} | \mathbf{z}, \boldsymbol{\rho}, \boldsymbol{\eta}; \mathcal{M}) p(\mathbf{z} | \Upsilon; \mathcal{M}) p(\boldsymbol{\psi} | \mathcal{M})}{p(\mathbf{y} | \mathcal{M})}. \quad (5.1)$$

On cherche à approcher cette loi par une loi séparable $q(\mathbf{x}, \mathbf{z}, \boldsymbol{\psi})$ qui facilite le calcul des estimateurs. Dans [HvC93], on utilise la théorie de l'information pour chercher la forme de q qui minimise la divergence d'information, dite la divergence de Kullback-Leibler $KL(q(\mathbf{u}) || p(\mathbf{u}))$, entre q et p :

$$KL(q(\mathbf{u}) || p(\mathbf{u} | \mathbf{y}; \mathcal{M})) = \int q(\mathbf{u}) \log \left(\frac{q(\mathbf{u})}{p(\mathbf{u} | \mathbf{y}; \mathcal{M})} \right) d\mathbf{u}, \quad (5.2)$$

où $\mathbf{u} = \{\mathbf{x}, \mathbf{z}, \boldsymbol{\psi}\}$ regroupe les inconnues. La divergence de Kullback a les propriétés suivantes :

- elle est toujours positive $KL(q || p) \geq 0, \forall q, p$, et elle s'annule quand les deux distributions sont identiques,
- elle est non symétrique $KL(q || p) \neq KL(p || q)$,
- elle est convexe $KL(\alpha q_1 + (1 - \alpha) q_2 || p) \leq \alpha KL(q_1 || p) + (1 - \alpha) KL(q_2 || p)$.

En développant l'expression de la divergence, on trouve :

$$\begin{aligned} KL(q(\mathbf{u}) || p(\mathbf{u} | \mathbf{y}; \mathcal{M})) &= \int q(\mathbf{u}) \log \left(\frac{q(\mathbf{u})}{p(\mathbf{u} | \mathbf{y}; \mathcal{M})} \right) d\mathbf{u} \\ &= \int q(\mathbf{u}) \log \left(\frac{q(\mathbf{u}) p(\mathbf{y} | \mathcal{M})}{p(\mathbf{u}, \mathbf{y} | \mathcal{M})} \right) d\mathbf{u} \\ &= \log(p(\mathbf{y} | \mathcal{M})) - \int q(\mathbf{u}) \log \left(\frac{p(\mathbf{u}, \mathbf{y} | \mathcal{M})}{q(\mathbf{u})} \right) d\mathbf{u} \\ &= \log(p(\mathbf{y} | \mathcal{M})) - \mathcal{F}(q) \end{aligned} \quad (5.3)$$

où $\mathcal{F}(q) = \int q(\mathbf{u}) \log \left(\frac{p(\mathbf{u}, \mathbf{y} | \mathcal{M})}{q(\mathbf{u})} \right) d\mathbf{u}$ est l'énergie libre négative :

$$\mathcal{F}(q) = \langle \log(p(\mathbf{y}, \mathbf{u} | \mathcal{M})) \rangle_q + \mathcal{H}(q), \quad (5.4)$$

avec $\mathcal{H}(q)$ l'entropie de la loi approchante :

$$\mathcal{H}(q) = - \int q(\mathbf{u}) \log(q(\mathbf{u})) d\mathbf{u}. \quad (5.5)$$

On peut faire deux remarques sur la dernière équation :

1. comme la divergence de Kullback-Leibler est positive, l'énergie libre négative donne une borne inférieure pour la log-évidence du modèle, $\log(p(\mathbf{y} | \mathcal{M})) \geq \mathcal{F}(q)$.
2. on peut chercher la forme de la loi approchante q en maximisant l'énergie libre négative au lieu de la divergence de Kullback-Leibler, puisque la log-évidence ne dépend pas de la loi approchante. Ceci permet d'avoir une interprétation au sens de la physique statistique comme on le verra dans le paragraphe 5.1.2.

Supposons que la loi approchante s'écrive sous la forme séparable suivante :

$$q(\mathbf{u}) = \prod_l q(u_l). \quad (5.6)$$

Ce problème d'optimisation fonctionnelle admet une solution sous la forme

$$q(u_l) = \exp \left(\langle \log(p(\mathbf{y}, \mathbf{u} | \mathcal{M})) \rangle_{q/l} - \Xi_{q_l} \right), \quad (5.7)$$

où $q/l = \prod_{l' \neq l} q(u_{l'})$ et Ξ_{q_l} est un facteur de normalisation.

Pour que la loi approchante soit exploitable en pratique, il est important que le calcul de $\langle \log(p(\mathbf{y}, \mathbf{u} | \mathcal{M})) \rangle_{q/l}$ donne une expression paramétrique. En utilisant la famille exponentielle conjuguée, la loi approchante aura une forme paramétrique et les paramètres de forme seront mutuellement dépendants. Pour retrouver leurs valeurs finales, ces paramètres peuvent être calculés de façon itérative. Un choix adapté des lois *a priori* [SQ06], le problème d'optimisation fonctionnelle se transforme en un problème de calcul paramétrique itératif où on répète le calcul de l'équation 5.7 pour toutes les composantes de séparation en utilisant les valeurs calculées à l'itération précédente.

Pour estimer la convergence de l'algorithme, on peut évaluer l'énergie libre négative $\mathcal{F}(q)$. À la convergence, on peut utiliser la valeur de l'énergie libre pour avoir une estimation de l'évidence du modèle sous l'hypothèse que la divergence de Kullback soit négligeable, ce qui permet de comparer la qualité entre différentes méthodes d'approximation. De plus, cette valeur permet de choisir entre différents modèles puisque l'évidence mesure l'adéquation aux données. Cela est valable si l'on considère que la divergence de Kullback ne change pas lorsque l'on change de modèle. Néanmoins, cette condition est difficile à vérifier spécialement pour les modèles complexes. L'énergie libre peut être obtenue à partir des paramètres de forme déjà calculés sans coût supplémentaire.

On résume l'approche bayésienne variationnelle par deux étapes principales :

1. le choix de la séparation dans la loi approchante $q(\mathbf{u}) = \prod_l q(u_l)$,
2. le calcul des lois approchantes et plus précisément le calcul de $\langle \log(p(\mathbf{y}, \mathbf{u} | \mathcal{M})) \rangle_{q/l}$ pour chaque loi approchante.

Dans le reste du chapitre, on présente le choix de séparation pour chaque approche. Ensuite on détaillera les expressions des lois approchantes et l'expression de l'énergie libre négative.

5.1.2 Lien avec la physique statistique

L'idée de maximiser l'énergie libre négative n'est pas nouvelle. On la trouve dans les travaux en physique statistique et notamment dans les travaux de Feynman [Fey72]. L'idée est d'approcher un potentiel de Gibbs :

$$p(\mathbf{u}) = \exp(\varphi_p(\mathbf{u}) - \Xi_p) \quad (5.8)$$

par un autre potentiel :

$$q(\mathbf{u}) = \exp(\varphi_q(\mathbf{u}) - \Xi_q), \quad (5.9)$$

en minimisant la variation moyenne entre les deux $\langle q(\mathbf{u}) - p(\mathbf{u}) \rangle$. Pour faciliter l'expression, on fait un développement au premier ordre :

$$\begin{aligned} \langle q(\mathbf{u}) - p(\mathbf{u}) \rangle_q &\approx \langle 1 + \varphi_p(\mathbf{u}) - \Xi_p - 1 - \varphi_q(\mathbf{u}) + \Xi_q \rangle_q \\ &\approx \langle \varphi_p(\mathbf{u}) \rangle_q - \langle \varphi_q(\mathbf{u}) \rangle_q + \Xi_p - \Xi_q = -\mathcal{F}(q). \end{aligned} \quad (5.10)$$

Ceci correspond à maximiser l'énergie libre négative que l'on a donnée dans l'équation 5.4.

5.2 Choix de séparation

La première étape dans l'approche bayésienne variationnelle consiste à choisir la forme de séparation dans la loi approchante. Il n'y a pas de règle pour ce choix et chaque problème peut avoir sa propre forme de séparation. On essaie généralement de garder les liens forts dans la loi approchante et de négliger les faibles. Il existe deux solutions extrêmes :

1. la première consiste à prendre une loi approchante sans séparation. Ceci n'est pas utile puisque l'on retombe sur la loi *a posteriori*,
2. la seconde est de choisir une séparation forte. Cela permet de faciliter le calcul des lois approchantes mais élimine la dépendance *a posteriori* entre les variables et la dépendance se limite aux moments seulement.

Dans notre application, nous avons testé deux formes de séparation. La première garde les liens *a posteriori* entre les éléments du contraste \mathbf{x} et ceux du champ caché \mathbf{z} . On l'utilise pour le modèle linéaire :

$$q(\mathbf{u}) = q(\mathbf{x}, \mathbf{z}, \boldsymbol{\psi}) = \prod_l q(x(l)|z(l))q(z(l))q(\rho_\epsilon) \prod_\kappa q(\rho_\kappa)q(\eta_\kappa). \quad (5.11)$$

Les solutions correspondantes à ce choix sont obtenues à partir de l'équation 5.7.

$$\begin{cases} q(x_l|z_l) \propto \exp \left(\langle \log(p(\mathbf{y}, \mathbf{x}, \mathbf{z}, \boldsymbol{\psi}|\mathcal{M})) \rangle_{\prod_{l' \neq l} q(x(l'))q(z(l'))q(\boldsymbol{\psi})} \right) \\ q(z_l) \propto \exp \left(\langle \log(p(\mathbf{y}, \mathbf{x}, \mathbf{z}, \boldsymbol{\psi}|\mathcal{M})) \rangle_{\prod_{l' \neq l} q(z(l'))q(\mathbf{x}|\mathbf{z})q(\boldsymbol{\psi})} \right) \\ q(\psi_l) \propto \exp \left(\langle \log(p(\mathbf{y}, \mathbf{x}, \mathbf{z}, \boldsymbol{\psi}|\mathcal{M})) \rangle_{\prod_{l' \neq l} q(\psi(l'))q(\mathbf{x}|\mathbf{z})q(\mathbf{z})} \right) \end{cases} \quad (5.12)$$

La seconde forme correspond à une séparation forte où on impose une indépendance *a posteriori* entre toutes les variables. On l'applique dans le cas du modèle non linéaire :

$$q(\mathbf{u}) = q(\mathbf{w}, \mathbf{x}, \mathbf{z}, \boldsymbol{\psi}) = \prod_l q(w(l)) \prod_{l'} q(x(l')) \prod_{l''} q(z(l'')) q(\rho_\epsilon)q(\rho_\xi) \prod_\kappa q(\rho_\kappa)q(\eta_\kappa). \quad (5.13)$$

Les solutions correspondantes sont :

$$\begin{cases} q(w_l) \propto \exp \left(\langle \log(p(\mathbf{y}, \mathbf{w}, \mathbf{x}, \mathbf{z}, \boldsymbol{\psi}|\mathcal{M})) \rangle_{\prod_{l' \neq l} q(w(l'))q(\mathbf{x})q(\mathbf{z})q(\boldsymbol{\psi})} \right) \\ q(x_l) \propto \exp \left(\langle \log(p(\mathbf{y}, \mathbf{w}, \mathbf{x}, \mathbf{z}, \boldsymbol{\psi}|\mathcal{M})) \rangle_{\prod_{l' \neq l} q(x(l'))q(\mathbf{w})q(\mathbf{z})q(\boldsymbol{\psi})} \right) \\ q(z_l) \propto \exp \left(\langle \log(p(\mathbf{y}, \mathbf{w}, \mathbf{x}, \mathbf{z}, \boldsymbol{\psi}|\mathcal{M})) \rangle_{\prod_{l' \neq l} q(z(l'))q(\mathbf{w})q(\mathbf{x})q(\boldsymbol{\psi})} \right) \\ q(\psi_l) \propto \exp \left(\langle \log(p(\mathbf{y}, \mathbf{w}, \mathbf{x}, \mathbf{z}, \boldsymbol{\psi}|\mathcal{M})) \rangle_{\prod_{l' \neq l} q(\psi(l'))q(\mathbf{w})q(\mathbf{x})q(\mathbf{z})} \right) \end{cases} \quad (5.14)$$

5.3 Le cas linéaire (vbLMGI-vbLMGM)

Dans cette section, on présente l'approche bayésienne variationnelle dans le cas d'un modèle direct linéaire. Nous commençons par un rappel des expressions des lois *a priori* et des vraisemblances utilisées dans ce cas. On rappelle aussi le choix de séparation. Ensuite, on donne les expressions des lois approchantes pour les différentes composantes :

$$p(\mathbf{y}|\mathbf{x}, \rho_\epsilon) = \mathcal{N}(\mathbf{H}\mathbf{x}, \rho_\epsilon \mathbf{I}), \quad (5.15)$$

$$p(\mathbf{x}|\mathbf{z}, \boldsymbol{\eta}, \boldsymbol{\rho}) = \mathcal{N}(\mathbf{m}_x, \mathbf{V}_x), \quad (5.16)$$

$$p(\mathbf{z} = \boldsymbol{\kappa}|\Upsilon) \propto \exp \left(\Upsilon \sum_{\mathbf{r}} \sum_{\mathbf{r}'} \delta(z(\mathbf{r}) - z(\mathbf{r}')) \right), \quad (5.17)$$

$$p(\eta_\kappa|\eta_0, \tau_0) = \mathcal{N}(\eta_0, \tau_0), \quad \forall \kappa, \quad (5.18)$$

$$p(\rho_\kappa|\gamma_0, \phi_0) = \mathcal{IG}(\gamma_0, \phi_0), \quad \forall \kappa, \quad (5.19)$$

$$p(\rho_\epsilon|\gamma_\epsilon, \phi_\epsilon) = \mathcal{IG}(\gamma_\epsilon, \phi_\epsilon). \quad (5.20)$$

$$(5.21)$$

En conséquence, la loi jointe des inconnues et des données prend la forme suivante :

$$\begin{aligned} \log(p(\mathbf{y}, \mathbf{x}, \mathbf{z}, \boldsymbol{\psi})) = & -\frac{M}{2} \log(\rho_\epsilon) - \frac{1}{2\rho_\epsilon} \|\mathbf{y} - \mathbf{H}\mathbf{x}\|_2^2 - \frac{\sum_{\kappa} N_{\kappa} \log(\rho_{\kappa})}{2} \\ & - \sum_{\kappa} \frac{\sum_{\mathbf{r} \in \mathcal{R}_{\kappa}} \mathcal{C}(\mathbf{r}) |x(\mathbf{r}) - \eta_{\kappa}|^2 + \frac{1-\mathcal{C}(\mathbf{r})}{2N_{\mathcal{V}}} \sum_{\mathbf{r}' \in \mathcal{V}(\mathbf{r})} |x(\mathbf{r}) - x(\mathbf{r}')|^2}{2\rho_{\kappa}} + \Upsilon \sum_{\mathbf{r}} \sum_{\mathbf{r}' \in \mathcal{V}(\mathbf{r})} \delta(z(\mathbf{r}) - z(\mathbf{r}')) \\ & - \frac{\sum_{\kappa} |\eta_{\kappa} - \eta_0|^2}{2\tau_0} - \sum_{\kappa} \left[\frac{\gamma_0}{\rho_{\kappa}} + (\phi_0 + 1) \log(\rho_{\kappa}) \right] - \frac{\gamma_{\epsilon}}{\rho_{\epsilon}} - (\phi_{\epsilon} + 1) \log(\rho_{\epsilon}). \end{aligned} \quad (5.22)$$

Dans cette partie, nous avons choisi une séparation qui garde les liens entre les éléments du contraste et le champ caché :

$$q(\mathbf{x}, \mathbf{z}, \boldsymbol{\psi}) = \prod_l q(x(l)|z(l)) q(z(l)) q(\rho_{\epsilon}) \prod_{\kappa} q(\rho_{\kappa}) q(\eta_{\kappa}). \quad (5.23)$$

Dans ce qui suit nous donnons les expressions des paramètres de forme des lois approchantes.

5.3.1 Contraste \mathbf{x}

La loi approchante pour le contraste $q(x(\mathbf{r}))$ s'écrit sous la forme :

$$\begin{aligned} \log(q(x(\mathbf{r}))|z(\mathbf{r})) & \propto \langle \log(p(\mathbf{x}, \mathbf{z}, \boldsymbol{\psi}, \mathbf{y})) \rangle_{\prod_{\mathbf{r}' \neq \mathbf{r}} q(x(\mathbf{r}')|z(\mathbf{r}')) q(z(\mathbf{r}')) q(\boldsymbol{\psi})} \\ & \propto \langle \log(p(\mathbf{y}|\mathbf{x}, \rho_{\epsilon})) + \log(p(\mathbf{x}|\mathbf{z}, \boldsymbol{\rho}, \boldsymbol{\eta})) \rangle_{\prod_{\mathbf{r}' \neq \mathbf{r}} q(x(\mathbf{r}')) q(\mathbf{z}) q(\boldsymbol{\psi})} \\ & \propto -\frac{1}{2} \left\langle \frac{\|\mathbf{y} - \mathbf{H}\mathbf{x}\|_2^2}{\rho_{\epsilon}} + (\mathbf{x} - \mathbf{m}_x)^t \mathbf{V}_x^{-1} (\mathbf{x} - \mathbf{m}_x) \right\rangle_{\prod_{\mathbf{r}' \neq \mathbf{r}} q(x(\mathbf{r}'), z(\mathbf{r}')) q(\boldsymbol{\psi})}. \end{aligned} \quad (5.24)$$

Ceci donne après développement :

$$q(x(\mathbf{r})|z(\mathbf{r}) = \kappa) = \mathcal{N}(\tilde{m}_{x,\kappa}(\mathbf{r}), \tilde{v}_{x,\kappa}(\mathbf{r})), \quad (5.25)$$

où

$$\tilde{v}_{x,\kappa}(\mathbf{r}) = \left[\overline{\rho_\epsilon^{-1}} \Gamma_{\mathbf{H}}(\mathbf{r}) + \overline{\rho_\kappa^{-1}} \right]^{-1}, \quad (5.26)$$

$$\begin{aligned} \tilde{m}_{x,\kappa}(\mathbf{r}) = (\tilde{v}_x(\mathbf{r})) & \left[\overline{\rho_\kappa^{-1}} \left(\frac{1 - \tilde{\mathcal{C}}_\kappa(\mathbf{r})}{N_{\mathcal{V}}} \sum_{\mathbf{r}'} \tilde{m}_{x,\kappa}(\mathbf{r}') + \tilde{\mathcal{C}}_\kappa(\mathbf{r}) \tilde{\eta}_\kappa \right) \right. \\ & \left. + \overline{\rho_\epsilon^{-1}} \sum_{\mathbf{r}'} h(\mathbf{r}', \mathbf{r}) \left(y(\mathbf{r}') - \sum_{\mathbf{r}'' \neq \mathbf{r}} h(\mathbf{r}', \mathbf{r}'') \tilde{m}_{x,\kappa}(\mathbf{r}'') \right) \right], \end{aligned} \quad (5.27)$$

où $\Gamma_{\mathbf{H}}(\mathbf{r}) = \sum_{\mathbf{r}'} h^2(\mathbf{r}', \mathbf{r})$, $\overline{\rho_\epsilon^{-1}} = \langle \rho_\epsilon^{-1} \rangle_q = \int \rho_\epsilon^{-1} q(\rho_\epsilon) d\rho_\epsilon$ et

$$\tilde{\mathcal{C}}_\kappa(\mathbf{r}) = \begin{cases} 1 & \text{MGI} \\ 1 - \prod_{\mathbf{r}' \in \mathcal{V}(\mathbf{r})} \tilde{\zeta}_\kappa(\mathbf{r}') & \text{MGM} \end{cases}. \quad (5.28)$$

La loi jointe du contraste devient une gaussienne multivariée avec une matrice de covariance diagonale. On donne son expression à l'itération n en fonction des autres variables à l'itération $n - 1$. Pour ne pas alourdir les notations, on écrira les variables sans l'indice $n - 1$:

$$q(\mathbf{x}|\mathbf{z} = \boldsymbol{\kappa}) = \mathcal{N}(\tilde{\mathbf{m}}_{x,\boldsymbol{\kappa}}, \tilde{\mathbf{V}}_{x,\boldsymbol{\kappa}}), \quad (5.29)$$

avec

$$\tilde{\mathbf{V}}_{x,\boldsymbol{\kappa}}^n = \left[\text{Diag} \left(\overline{\rho_\epsilon^{-1}} \Gamma_{\mathbf{H}} + \overline{\rho_\kappa^{-1}} \right) \right]^{-1}, \quad (5.30)$$

$$\tilde{\mathbf{m}}_{x,\boldsymbol{\kappa}}^n = \tilde{\mathbf{m}}_{x,\boldsymbol{\kappa}} + \tilde{\mathbf{V}}_{x,\boldsymbol{\kappa}}^n \left[\overline{\rho_\kappa^{-1}} (\tilde{\mathbf{m}}_{x,\boldsymbol{\kappa}}^\dagger - \tilde{\mathbf{m}}_{x,\boldsymbol{\kappa}}) + \overline{\rho_\epsilon^{-1}} \mathbf{H}^t (\mathbf{y} - \mathbf{H} \tilde{\mathbf{m}}_{x,\boldsymbol{\kappa}}) \right] \quad (5.31)$$

$\text{Diag}(\mathbf{a})$ est la matrice diagonale de vecteur \mathbf{a} et

$$\tilde{m}_{x,\boldsymbol{\kappa}}^\dagger(\mathbf{r}) = \frac{1 - \tilde{\mathcal{C}}_\kappa(\mathbf{r})}{N_{\mathcal{V}}} \sum_{\mathbf{r}' \in \mathcal{V}(\mathbf{r})} \tilde{m}_{x,\boldsymbol{\kappa}}(\mathbf{r}') + \tilde{\mathcal{C}}_\kappa(\mathbf{r}) \tilde{\eta}_\kappa. \quad (5.32)$$

On remarque que l'expression de mise à jour de la moyenne ressemble à celle qui serait obtenues si une méthode de type gradient avait été utilisée pour résoudre le problème d'optimisation (cf. annexe C.5).

5.3.2 Champ caché z

La solution de la loi de probabilité du champ caché s'écrit sous la forme :

$$\begin{aligned}
 \log(q(z(\mathbf{r}) = \kappa)) &= \log(\tilde{\zeta}_\kappa(\mathbf{r})) \\
 &\propto -\frac{1}{2} \left(\Psi(\tilde{\gamma}_\kappa) - \log(\tilde{\phi}_\kappa) + \log(\tilde{v}_{x,\kappa}^n(\mathbf{r})) + \frac{[(\tilde{m}_{x,\kappa}^n(\mathbf{r}) - \tilde{m}_{x,\kappa}(\mathbf{r}))^2 - (\tilde{m}_{x,\kappa}^n(\mathbf{r}))^2]}{\tilde{v}_{x,\kappa}^n(\mathbf{r})} \right. \\
 &\quad \left. + \frac{1}{\rho_\kappa^{-1}} \left[\frac{1 - \tilde{\mathcal{C}}_\kappa(\mathbf{r})}{N_{\mathcal{V}}^2} \left[\left(\sum_{\mathbf{r}' \in \mathcal{V}(\mathbf{r})} \tilde{m}_{x,\kappa}(\mathbf{r}') \right)^2 + \tilde{v}_{x,\kappa}(\mathbf{r}') \right] + \tilde{\mathcal{C}}_\kappa(\mathbf{r}) [\tilde{\eta}_\kappa^2 + \tilde{\tau}_\kappa] \right] \right) \\
 &\quad \left. + \Upsilon \sum_{\mathbf{r}' \in \mathcal{V}(\mathbf{r})} \tilde{\zeta}_\kappa(\mathbf{r}') \right). \quad (5.33)
 \end{aligned}$$

Dans la loi jointe $q(\mathbf{z} = \boldsymbol{\kappa}) = \prod_{\mathbf{r}} q(z(\mathbf{r}) = \kappa) = \prod_{\mathbf{r}} \tilde{\zeta}_\kappa(\mathbf{r})$, la probabilité d'un voxel du champ caché se calcule à partir des probabilités des voisins à l'itération précédente.

5.3.3 Hyper-paramètres ψ

On définit ici les lois approchantes des hyper-paramètres $\psi = \{\rho_\epsilon, \boldsymbol{\rho}, \boldsymbol{\eta}\}$

Variance de bruit ρ_ϵ

$$\begin{aligned}
 \log(q(\rho_\epsilon)) &\propto \left\langle -\frac{M}{2} \log(\rho_\epsilon) - \frac{\|\mathbf{y} - \mathbf{H}\mathbf{x}\|_2^2}{2\rho_\epsilon} \right. \\
 &\quad \left. - \frac{\gamma_\epsilon}{\rho_\epsilon} - (\phi_\epsilon + 1) \log(\rho_\epsilon) \right\rangle_{q(\mathbf{x}, \mathbf{z}) \prod_{l \neq \rho_\epsilon} q(\psi_l)}. \quad (5.34)
 \end{aligned}$$

Ceci donne une loi inverse-gamma $q(\rho_\epsilon) = \mathcal{IG}(\tilde{\gamma}_\epsilon, \tilde{\phi}_\epsilon)$ avec les paramètres de forme suivants :

$$\tilde{\phi}_\epsilon = \phi_\epsilon + \frac{M}{2}, \quad (5.35)$$

$$\tilde{\gamma}_\epsilon = \gamma_\epsilon + \frac{1}{2} \left(\|\mathbf{y}\|_2^2 + \|\mathbf{H}\tilde{\mathbf{m}}_x\|_2^2 - 2\mathbf{y}^t \mathbf{H}\tilde{\mathbf{m}}_x + \Gamma_{\mathbf{H}}^t \tilde{\mathbf{v}}_x + \|\Gamma^{\mathbf{H}} \circ (\tilde{\mathbf{m}}_{x2} - \tilde{\mathbf{m}}_x^2)\|_1 \right), \quad (5.36)$$

où

$$\tilde{\mathbf{m}}_x = \sum_{\kappa} \tilde{\zeta}_\kappa \circ \tilde{\mathbf{m}}_{x,\kappa}, \quad (5.37)$$

$$\tilde{\mathbf{m}}_{x2} = \sum_{\kappa} \tilde{\zeta}_\kappa \circ \tilde{\mathbf{m}}_{x,\kappa}^2, \quad (5.38)$$

$$\tilde{\mathbf{v}}_x = \sum_{\kappa} \tilde{\zeta}_\kappa \circ \tilde{\mathbf{v}}_{x,\kappa}. \quad (5.39)$$

Variances des classes ρ_κ

$$\forall \kappa \in \{1, \dots, K\}, \quad \log(q(\rho_\kappa)) \propto - \left\langle \frac{1}{2} \sum_{\mathbf{r}} \delta(z(\mathbf{r}) = \kappa) \left(\log(\rho_\kappa) + \frac{|x(\mathbf{r}) - m_x(\mathbf{r})|^2}{\rho_\kappa} \right) + \frac{\gamma_0}{\rho_\kappa} + (\phi_0 + 1) \log(\rho_\kappa) \right\rangle_{q(\mathbf{x}, \mathbf{z}) \prod_{l \neq \rho_\kappa} q(\psi_l)} . \quad (5.40)$$

La loi *a priori* choisie permet de retrouver une loi inverse-gamma pour l'*a posteriori* approchante :

$$q(\rho_\kappa) = \mathcal{IG}(\tilde{\gamma}_\kappa, \tilde{\phi}_\kappa), \quad \forall \kappa \in \{1, \dots, K\}, \quad (5.41)$$

$$\tilde{\phi}_\kappa = \phi_0 + \frac{\sum_{\mathbf{r}} \tilde{\zeta}_\kappa(\mathbf{r})}{2}, \quad (5.42)$$

$$\tilde{\gamma}_\kappa = \gamma_0 + \frac{1}{2} \sum_{\mathbf{r}} \tilde{\zeta}_\kappa(\mathbf{r}) [\tilde{m}_{x,\kappa}(\mathbf{r})^2 + \tilde{v}_{x,\kappa}(\mathbf{r}) + \tilde{m}_{x,\kappa}^{\dagger 2}(\mathbf{r}) - 2\tilde{m}_{x,\kappa}^\dagger(\mathbf{r})\tilde{m}_{x,\kappa}(\mathbf{r})], \quad (5.43)$$

avec

$$\tilde{m}_{x,\kappa}^{\dagger 2}(\mathbf{r}) = \frac{1 - \tilde{\mathcal{C}}_\kappa(\mathbf{r})}{2N_{\mathcal{V}}} \left[\sum_{\mathbf{r}' \in \mathcal{V}(\mathbf{r})} (\tilde{m}_{x,\kappa}(\mathbf{r}'))^2 + \sum_{\mathbf{r}' \in \mathcal{V}(\mathbf{r})} \tilde{v}_{x,\kappa}(\mathbf{r}') \right] + \tilde{\mathcal{C}}_\kappa(\mathbf{r}) [\tilde{\eta}_\kappa^2 + \tilde{\tau}_\kappa]. \quad (5.44)$$

 Moyennes des classes η_κ

$$\forall \kappa, \quad \log(q(\eta_\kappa)) \propto - \left\langle \frac{1}{2} \sum_{\mathbf{r}} \left(\frac{|x(\mathbf{r}) - m_x(\mathbf{r})|^2}{\rho_\kappa} \right) + \frac{|\eta_\kappa - \eta_0|^2}{\tau_0} \right\rangle_{q(\mathbf{x}, \mathbf{z}) \prod_{l \neq \eta_\kappa} q(\psi_l)} . \quad (5.45)$$

Par conséquent, la loi *a posteriori* devient :

$$q(\eta_\kappa) = \mathcal{N}(\tilde{\eta}_\kappa, \tilde{\tau}_\kappa), \quad \forall \kappa \in \{1, \dots, K\}, \quad (5.46)$$

$$\tilde{\tau}_\kappa = \left[\tau_0^{-1} + \overline{\rho_\kappa^{-1}} \sum_{\mathbf{r}} \tilde{\mathcal{C}}_\kappa(\mathbf{r}) \tilde{\zeta}_\kappa(\mathbf{r}) \right]^{-1}, \quad (5.47)$$

$$\tilde{\eta}_\kappa = \tilde{\tau}_\kappa \left[\frac{\eta_0}{\tau_0} + \overline{\rho_\kappa^{-1}} \sum_{\mathbf{r}} \tilde{\mathcal{C}}_\kappa(\mathbf{r}) \tilde{\zeta}_\kappa(\mathbf{r}) \tilde{m}_{x,\kappa}(\mathbf{r}) \right]. \quad (5.48)$$

5.4 Le cas non linéaire (vbCSMGI-vbCSMGM)

Dans cette section, on présente l'approche bayésienne variationnelle dans le cas d'un modèle direct non linéaire. On rappelle tout d'abord les expressions des lois *a priori* et les vraisemblances utilisées dans ce cas. Ensuite, on donne la forme de séparation et les expressions des lois approchantes pour les différentes grandeurs.

$$p(\mathbf{y}|\mathbf{w}, \rho_\epsilon) = \mathcal{N}(\mathbf{G}^o \mathbf{w}, \rho_\epsilon \mathbf{I}), \quad (5.49)$$

$$p(\mathbf{w}|\mathbf{x}, \rho_\xi) = \mathcal{N}(\mathbf{m}_w, \mathbf{V}_w), \quad (5.50)$$

$$p(\mathbf{x}|\mathbf{z}, \boldsymbol{\eta}, \boldsymbol{\rho}) = \mathcal{N}(\mathbf{m}_x, \mathbf{V}_x), \quad (5.51)$$

$$p(\mathbf{z} = \boldsymbol{\kappa}|\Upsilon) \propto \exp \left(\Upsilon \sum_{\mathbf{r}} \sum_{\mathbf{r}'} \delta(z(\mathbf{r}) - z(\mathbf{r}')) \right), \quad (5.52)$$

$$p(\eta_\kappa|\eta_0, \tau_0) = \mathcal{N}(\eta_0, \tau_0), \quad \forall \kappa, \quad (5.53)$$

$$p(\rho_\kappa|\gamma_0, \phi_0) = \mathcal{IG}(\gamma_0, \phi_0), \quad \forall \kappa, \quad (5.54)$$

$$p(\rho_\epsilon|\gamma_\epsilon, \phi_\epsilon) = \mathcal{IG}(\gamma_\epsilon, \phi_\epsilon), \quad (5.55)$$

$$p(\rho_\xi|\gamma_\epsilon, \phi_\xi) = \mathcal{IG}(\gamma_\xi, \phi_\xi). \quad (5.56)$$

En conséquence, la loi jointe des inconnues et des données prend la forme suivante :

$$\begin{aligned} \log(p(\mathbf{y}, \mathbf{w}, \mathbf{x}, \mathbf{z}, \boldsymbol{\psi})) = & -\frac{M}{2} \log(\rho_\epsilon) - \frac{1}{2\rho_\epsilon} \|\mathbf{y} - \mathbf{G}^o \mathbf{w}\|_2^2 - \frac{N N_p N_f N_v}{2} \log(\rho_\xi) \\ & - \frac{1}{2\rho_\xi} \|\mathbf{w} - \mathbf{X} \mathbf{E}\|_2^2 - \frac{\sum_k N_k \log(\rho_\kappa)}{2} - \sum_{\kappa} \frac{\sum_{\mathbf{r} \in \mathcal{R}_\kappa} \mathcal{C}(\mathbf{r}) |x(\mathbf{r}) - \eta_\kappa(\mathbf{r})|^2}{2\rho_\kappa} \\ & + \frac{\sum_{\mathbf{r} \in \mathcal{R}_\kappa} (1 - \mathcal{C}(\mathbf{r})) \sum_{\mathbf{r}' \in \mathcal{V}(\mathbf{r})} |x(\mathbf{r}) - x(\mathbf{r}')|^2}{4\rho_\kappa N_{\mathcal{V}}} + \Upsilon \sum_{\mathbf{r}} \sum_{\mathbf{r}' \in \mathcal{V}(\mathbf{r})} \delta(z(\mathbf{r}) - z(\mathbf{r}')) - \frac{\sum_{\kappa} |\eta_\kappa - \eta_0|^2}{2\tau_0} \\ & - \sum_{\kappa} \left[\frac{\gamma_0}{\rho_\kappa} + (\phi_0 + 1) \log(\rho_\kappa) \right] - \frac{\gamma_\epsilon}{\rho_\epsilon} - (\phi_\epsilon + 1) \log(\rho_\epsilon) - \frac{\gamma_\xi}{\rho_\xi} - (\phi_\xi + 1) \log(\rho_\xi). \end{aligned} \quad (5.57)$$

Dans cette partie, on choisit une séparation forte de tous les paramètres et la loi *a posteriori* approchante s'écrit comme suit :

$$q(\mathbf{w}, \mathbf{x}, \mathbf{z}, \boldsymbol{\psi}) = \prod_{\mathbf{r}} q(w(\mathbf{r})) \prod_{\mathbf{r}'} q(x(\mathbf{r}')) \prod_{\mathbf{r}''} q(z(\mathbf{r}'')) \prod_l q(\psi_l). \quad (5.58)$$

Ce choix permet de faciliter les expressions des paramètres de forme des lois approchantes sans trop réduire la qualité de l'approximation. Dans la suite, on donnera leurs expressions.

5.4.1 Courants induits \mathbf{w}

Comme on l'a vu dans la section (5.1.1), le logarithme de la loi approchante pour un indice \mathbf{r} s'écrit sous la forme :

$$\begin{aligned} \log(q(w(\mathbf{r}))) & \propto \langle \log(p(\mathbf{w}, \mathbf{x}, \mathbf{z}, \boldsymbol{\psi}, \mathbf{y})) \rangle_{\prod_{\mathbf{r}' \neq \mathbf{r}} q(w(\mathbf{r}')) q(\mathbf{x}) q(\mathbf{z}) q(\boldsymbol{\psi})} \\ & \propto \langle \log(p(\mathbf{y}|\mathbf{w}, \rho_\epsilon)) + \log(p(\mathbf{w}|\mathbf{x}, \rho_\xi)) \rangle_{\prod_{\mathbf{r}' \neq \mathbf{r}} q(w(\mathbf{r}')) q(\mathbf{x}) q(\mathbf{z}) q(\boldsymbol{\psi})} \\ & \propto -\frac{1}{2} \left\langle \frac{\|\mathbf{y} - \mathbf{G}^o \mathbf{w}\|_2^2}{\rho_\epsilon} + \frac{\|\mathbf{w} - \mathbf{X} \mathbf{E}^o - \mathbf{X} \mathbf{G}^c \mathbf{w}\|_2^2}{\rho_\xi} \right\rangle_{\prod_{\mathbf{r}' \neq \mathbf{r}} q(w(\mathbf{r}')) q(\mathbf{x}) q(\mathbf{z}) q(\boldsymbol{\psi})}. \end{aligned} \quad (5.59)$$

Après développement, on trouve :

$$q(w(\mathbf{r})) = \mathcal{N}(\tilde{m}_w(\mathbf{r}), \tilde{v}_w(\mathbf{r})), \quad (5.60)$$

où

$$\tilde{v}_w(\mathbf{r}) = \left[\overline{\rho_\epsilon^{-1}} \Gamma^o(\mathbf{r}) + \overline{\rho_\xi^{-1}} \overline{\Gamma^{xc}}(\mathbf{r}) \right]^{-1}, \quad (5.61)$$

$$\tilde{m}_w(\mathbf{r}) = \tilde{v}_w(\mathbf{r}) \delta_{\mathbf{r}}^t \left[\overline{\rho_\epsilon^{-1}} \mathbf{G}^{oH} (\mathbf{y} - \mathbf{G}^o \tilde{\mathbf{m}}_{w,/r}) + \overline{\rho_\xi^{-1}} \left\langle \mathbf{G}^{xcH} (\mathbf{X} \mathbf{E}^o - \mathbf{G}^{xc} \mathbf{w}_{/r}) \right\rangle \right], \quad (5.62)$$

avec

$$\Gamma^o(\mathbf{r}) = \sum_{\mathbf{r}'} |g^o(\mathbf{r}', \mathbf{r})|^2, \mathbf{G}^{xc} = (\mathbf{I} - \mathbf{X} \mathbf{G}^c), \Gamma^{xc}(\mathbf{r}) = \sum_{\mathbf{r}'} |g^{xc}(\mathbf{r}', \mathbf{r})|^2$$

$$\begin{aligned} \left\langle \mathbf{G}^{xcH} (\mathbf{X} \mathbf{E}^o - \mathbf{G}^{xc} \mathbf{w}_{/r}) \right\rangle &= \tilde{\mathbf{M}}_x \mathbf{E}^o - \mathbf{G}^{cH} (\tilde{\mathbf{M}}_x^2 + \tilde{\mathbf{V}}_x) \mathbf{E}^o - \tilde{\mathbf{m}}_{w,/r} \\ &+ \tilde{\mathbf{M}}_x \mathbf{G}^c \tilde{\mathbf{m}}_{w,/r} + \mathbf{G}^{cH} \tilde{\mathbf{M}}_x^* \tilde{\mathbf{m}}_{w,/r} - \mathbf{G}^{cH} (\tilde{\mathbf{M}}_x^2 + \tilde{\mathbf{V}}_x) \mathbf{G}^c \tilde{\mathbf{m}}_{w,/r}. \end{aligned} \quad (5.63)$$

Comme la matrice de couplage \mathbf{G}^c n'est pas calculée en pratique mais appliquée sous forme d'opérateur, on doit retrouver l'équivalent d'une manière fonctionnelle pour la grandeur Γ^{xc} :

$$\overline{\Gamma^{xc}}(\mathbf{r}) = 1 - 2\Re(g^c(\mathbf{r}, \mathbf{r}) \tilde{m}_x(\mathbf{r})) + (\tilde{m}_x(\mathbf{r})^2 + \tilde{v}_x(\mathbf{r})) \sum_{\mathbf{r}'} |g^c(\mathbf{r}', \mathbf{r})|^2, \quad (5.64)$$

où les opérateurs équivalents aux $g^c(\mathbf{r}, \mathbf{r})$ et $|g^c(\mathbf{r}', \mathbf{r})|^2$ sont donnés dans l'annexe D.5.

En conséquence, la loi jointe $q(\mathbf{w})$ sera une gaussienne multivariée. On donne les paramètres de forme à l'itération n en fonction des autres paramètres à l'itération $n-1$. Par souci de lisibilité, on ne marque pas l'indice $n-1$:

$$q(\mathbf{w}) = \prod_{\mathbf{r}} q(w(\mathbf{r})) = \mathcal{N}(\tilde{\mathbf{m}}_w, \tilde{\mathbf{V}}_w) \quad (5.65)$$

$$\tilde{\mathbf{V}}_w^n = \left[\text{Diag} \left(\overline{\rho_\epsilon^{-1}} \Gamma^o + \overline{\rho_\xi^{-1}} \overline{\Gamma^{xc}} \right) \right]^{-1} \quad (5.66)$$

$$\begin{aligned} \tilde{\mathbf{m}}_w^n &= \tilde{\mathbf{m}}_w + \left(\tilde{\mathbf{V}}_w^n \right) \left[\overline{\rho_\epsilon^{-1}} \mathbf{G}^{oH} (\mathbf{y} - \mathbf{G}^o \tilde{\mathbf{m}}_w) + \overline{\rho_\xi^{-1}} \left(\tilde{\mathbf{M}}_x \mathbf{E}^o - \mathbf{G}^{cH} (\tilde{\mathbf{M}}_x^2 + \tilde{\mathbf{V}}_x) \mathbf{E}^o \right. \right. \\ &\quad \left. \left. - \tilde{\mathbf{m}}_w + \tilde{\mathbf{M}}_x \mathbf{G}^c \tilde{\mathbf{m}}_w + \mathbf{G}^{cH} \tilde{\mathbf{M}}_x^* \tilde{\mathbf{m}}_w - \mathbf{G}^{cH} (\tilde{\mathbf{M}}_x^2 + \tilde{\mathbf{V}}_x) \mathbf{G}^c \tilde{\mathbf{m}}_w \right) \right]. \end{aligned} \quad (5.67)$$

5.4.2 Contraste x

La loi approchante pour le contraste $q(x(\mathbf{r}))$ s'écrit sous la forme :

$$\begin{aligned} \log(q(x(\mathbf{r}))) &\propto \langle \log(p(\mathbf{w}, \mathbf{x}, \mathbf{z}, \boldsymbol{\psi}, \mathbf{y})) \rangle_{\prod_{\mathbf{r}' \neq \mathbf{r}} q(x(\mathbf{r}')) q(\mathbf{w}) q(\mathbf{z}) q(\boldsymbol{\psi})} \\ &\propto \langle \log(p(\mathbf{w}|\mathbf{x}, \rho_\xi)) + \log(p(\mathbf{x}|\mathbf{z}, \boldsymbol{\rho}, \boldsymbol{\eta})) \rangle_{\prod_{\mathbf{r}' \neq \mathbf{r}} q(x(\mathbf{r}')) q(\mathbf{w}) q(\mathbf{z}) q(\boldsymbol{\psi})} \\ &\propto -\frac{1}{2} \left\langle \frac{\|\mathbf{w} - \mathbf{X} \mathbf{E}\|_2^2}{\rho_\xi} + (\mathbf{x} - \mathbf{m}_x)^H \mathbf{V}_x^{-1} (\mathbf{x} - \mathbf{m}_x) \right\rangle_{\prod_{\mathbf{r}' \neq \mathbf{r}} q(x(\mathbf{r}')) q(\mathbf{w}) q(\mathbf{z}) q(\boldsymbol{\psi})}. \end{aligned} \quad (5.68)$$

Ceci donne après développement :

$$q(x(\mathbf{r})) = \mathcal{N}(\tilde{m}_x(\mathbf{r}), \tilde{v}_x(\mathbf{r})), \quad (5.69)$$

où

$$\tilde{v}_x(\mathbf{r}) = \left[\overline{\rho_\xi^{-1}} \overline{\mathbf{E}^2}(\mathbf{r}) + \overline{v_x^{-1}}(\mathbf{r}) \right]^{-1}, \quad (5.70)$$

$$\tilde{m}_x(\mathbf{r}) = (\tilde{v}_x(\mathbf{r})) \left[\overline{\left(\frac{m_x(\mathbf{r})}{v_x(\mathbf{r})} \right)} + \overline{\rho_\xi^{-1}} \overline{w(\mathbf{r}) E^*(\mathbf{r})} \right], \quad (5.71)$$

avec $\overline{v_x^{-1}}(\mathbf{r}) = \sum_{\kappa=1}^K \tilde{\zeta}_\kappa(\mathbf{r}) \overline{\rho_\kappa^{-1}}$,

$$\overline{\left(\frac{m_x(\mathbf{r})}{v_x(\mathbf{r})} \right)} = \sum_{\kappa=1}^K \tilde{\zeta}_\kappa(\mathbf{r}) \overline{\rho_\kappa^{-1}} \left(\tilde{\mathcal{C}}_\kappa(\mathbf{r}) \tilde{\eta}_\kappa + \frac{1 - \tilde{\mathcal{C}}_\kappa(\mathbf{r})}{N_V} \sum_{\mathbf{r}' \in \mathcal{V}(\mathbf{r})} \tilde{m}_x(\mathbf{r}') \right), \quad (5.72)$$

$$\begin{aligned} \overline{E^2}(\mathbf{r}) = \sum_{N_v, N_f, N_P} |E^o(\mathbf{r})|^2 + 2\Re e(\mathbf{E}^{o*}(\mathbf{r}) \mathbf{G}^c \tilde{\mathbf{m}}_w(\mathbf{r})) \\ + \left| \sum_{\mathbf{r}'} g^c(\mathbf{r}, \mathbf{r}') \tilde{m}_w(\mathbf{r}') \right|^2 + \sum_{\mathbf{r}'} |g^c(\mathbf{r}, \mathbf{r}')|^2 \tilde{v}_w(\mathbf{r}'), \end{aligned} \quad (5.73)$$

et

$$\overline{w(\mathbf{r}) E^*(\mathbf{r})} = \sum_{N_v, N_f, N_P} E^{o*}(\mathbf{r}) \tilde{m}_w(\mathbf{r}) + \tilde{m}_w(\mathbf{r}) \sum_{\mathbf{r}'} g^{c*}(\mathbf{r}, \mathbf{r}') \tilde{m}_w^*(\mathbf{r}') + g^{c*}(\mathbf{r}, \mathbf{r}) \tilde{v}_w(\mathbf{r}). \quad (5.74)$$

La loi jointe du contraste $q(\mathbf{x})$ devient :

$$q(\mathbf{x}) = \prod_{\mathbf{r}} q(x(\mathbf{r})) = \mathcal{N}(\tilde{\mathbf{m}}_x, \tilde{\mathbf{V}}_x), \quad (5.75)$$

$$\tilde{\mathbf{V}}_x^n = \left[\mathbf{Diag} \left(\overline{\rho_\xi^{-1}} \overline{\mathbf{E}^2} + \overline{\mathbf{V}_x^{-1}} \right) \right]^{-1}, \quad (5.76)$$

$$\tilde{\mathbf{m}}_x^n = (\tilde{\mathbf{V}}_x^n) \left[\sum_{\kappa} \overline{\rho_\kappa^{-1}} \tilde{\zeta}_\kappa \circ \tilde{\mathbf{m}}_x^\dagger + \overline{\rho_\xi^{-1}} \mathbf{w} \circ \mathbf{E}^* \right], \quad (5.77)$$

avec

$$\tilde{m}_x^\dagger(\mathbf{r}) = \tilde{\mathcal{C}}_\kappa(\mathbf{r}) \tilde{\eta}_\kappa + \frac{1 - \tilde{\mathcal{C}}_\kappa(\mathbf{r})}{N_V} \sum_{\mathbf{r}' \in \mathcal{V}(\mathbf{r})} \tilde{m}_x(\mathbf{r}'). \quad (5.78)$$

et

$$\tilde{\mathcal{C}}_\kappa(\mathbf{r}) = \begin{cases} 1 & \text{MGI} \\ 1 - \prod_{\mathbf{r}' \in \mathcal{V}(\mathbf{r})} \tilde{\zeta}_\kappa(\mathbf{r}') & \text{MGM} \end{cases}. \quad (5.79)$$

5.4.3 Champ caché z

La loi de probabilité approchante du champ caché s'écrit sous la forme :

$$\begin{aligned}
 \log(q(z(\mathbf{r}) = \kappa)) &= \log(\tilde{\zeta}_\kappa(\mathbf{r})) \propto \\
 &- \left\langle \frac{1}{2} \log(\rho_\kappa) + \frac{\|x(\mathbf{r}) - m_x(\mathbf{r})\|_2^2}{2\rho_\kappa} - \Upsilon \sum_{\mathbf{r}'' \in \mathcal{V}(\mathbf{r})} \delta(z(\mathbf{r}'') - \kappa) \right\rangle_{\prod_{\mathbf{r}' \neq \mathbf{r}} q(z(\mathbf{r}')) q(\mathbf{w}) q(\mathbf{x}) q(\psi)} \\
 &\propto -\frac{1}{2} \left(\Psi(\tilde{\gamma}_\kappa) - \log(\tilde{\phi}_\kappa) + \overline{\rho_\kappa^{-1}} [|\tilde{m}_x(\mathbf{r})|^2 + \tilde{m}_x^{\dagger 2}(\mathbf{r}) - 2\Re(\tilde{m}_x^\dagger(\mathbf{r}) \tilde{m}_x^*(\mathbf{r})) + \tilde{v}_x(\mathbf{r})] \right) \\
 &\quad + \Upsilon \sum_{\mathbf{r}' \in \mathcal{V}(\mathbf{r})} \tilde{\zeta}_\kappa(\mathbf{r}'), \quad (5.80)
 \end{aligned}$$

avec

$$\tilde{m}_x^{\dagger 2}(\mathbf{r}) = \frac{1 - \tilde{\mathcal{C}}_\kappa(\mathbf{r})}{N_{\mathcal{V}}^2} \left[\left| \sum_{\mathbf{r}' \in \mathcal{V}(\mathbf{r})} \tilde{m}_x(\mathbf{r}') \right|^2 + \sum_{\mathbf{r}' \in \mathcal{V}(\mathbf{r})} \tilde{v}_x(\mathbf{r}') \right] + \tilde{\mathcal{C}}_\kappa(\mathbf{r}) [\tilde{\eta}_\kappa^2 + \tilde{\tau}_\kappa]. \quad (5.81)$$

Dans la loi approchante $q(\mathbf{z} = \kappa) = \prod_{\mathbf{r}} q(z(\mathbf{r}) = \kappa) = \prod_{\mathbf{r}} \tilde{\zeta}_\kappa(\mathbf{r})$, on calcule la probabilité d'un site de champ caché à partir des probabilités des voisins à l'itération précédente.

5.4.4 Hyper-paramètres

Variance de bruit d'observation ρ_ϵ

$$\begin{aligned}
 \log(q(\rho_\epsilon)) &\propto \left\langle \frac{-M}{2} \log(\rho_\epsilon) - \frac{\|\mathbf{y} - \mathbf{G}^o \mathbf{w}\|_2^2}{2\rho_\epsilon} \right. \\
 &\quad \left. - \frac{\gamma_\epsilon}{\rho_\epsilon} - (\phi_\epsilon + 1) \log(\rho_\epsilon) \right\rangle_{q(\mathbf{w}) q(\mathbf{x}) q(\mathbf{z}) \prod_{l \neq \rho_\epsilon} q(\psi_l)}. \quad (5.82)
 \end{aligned}$$

Ceci donne une loi inverse-gamma $q(\rho_\epsilon) = \mathcal{IG}(\tilde{\gamma}_\epsilon, \tilde{\phi}_\epsilon)$ dont les paramètres de forme sont :

$$\tilde{\phi}_\epsilon = \phi_\epsilon + \frac{M}{2}, \quad (5.83)$$

$$\tilde{\gamma}_\epsilon = \gamma_\epsilon + \frac{1}{2} \left(\|\mathbf{y}\|_2^2 + \|\mathbf{G}^o \tilde{\mathbf{m}}_w\|_2^2 - 2\Re(\mathbf{y}^H \mathbf{G}^o \tilde{\mathbf{m}}_w) + \|\mathbf{G}^{o2} \tilde{\mathbf{v}}_w\|_1 \right). \quad (5.84)$$

Variance de bruit de couplage ρ_ξ

$$\log(q(\rho_\xi)) \propto \left\langle \log\left(\rho_\xi^{\frac{-N_p N_v N_f N}{2}}\right) - \frac{\|\mathbf{w} - \mathbf{X}\mathbf{E}\|_2^2}{2\rho_\xi} - \frac{\gamma_\xi}{\rho_\xi} - (\phi_\xi + 1) \log(\rho_\xi) \right\rangle_{q(\mathbf{w})q(\mathbf{x})q(\mathbf{z})\prod_{l \neq \rho_\xi} q(\psi_l)}. \quad (5.85)$$

On obtient une loi inverse-gamma $q(\rho_\xi) = \mathcal{IG}(\tilde{\gamma}_\xi, \tilde{\phi}_\xi)$ avec les paramètres de forme

$$\tilde{\phi}_\xi = \phi_\xi + \frac{N_p N_v N_f N}{2}, \quad (5.86)$$

$$\tilde{\gamma}_\xi = \gamma_\xi + \frac{1}{2} \left(\|\tilde{\mathbf{m}}_w\|_2^2 + \|\tilde{\mathbf{V}}_w\|_1 + \left\| (\tilde{\mathbf{M}}_x^2 + \tilde{\mathbf{V}}_x) \overline{\mathbf{E}^2} \right\|_1 - 2\Re(\tilde{\mathbf{m}}_x^H \overline{\mathbf{w} \circ \mathbf{E}^*}) \right), \quad (5.87)$$

où les expressions de $\overline{\mathbf{E}^2}$ et $\overline{\mathbf{w} \circ \mathbf{E}^*}$ sont données par les équations (5.73) et (5.74).

Variances des classes ρ_κ

$$\forall \kappa \in \{1, \dots, K\}, \quad \log(q(\rho_\kappa)) \propto - \left\langle \frac{1}{2} \sum_{\mathbf{r}} \left(\log(\rho_\kappa) + \frac{|x(\mathbf{r}) - \eta_\kappa|^2}{\rho_\kappa} \right) + \frac{\gamma_0}{\rho_\kappa} + (\phi_0 + 1) \log(\rho_\kappa) \right\rangle_{q(\mathbf{w})q(\mathbf{x})q(\mathbf{z})\prod_{l \neq \rho_\kappa} q(\psi_l)}. \quad (5.88)$$

On retrouve une loi inverse-gamma pour l'*a posteriori* approchant :

$$q(\rho_\kappa) = \mathcal{IG}(\tilde{\gamma}_\kappa, \tilde{\phi}_\kappa), \quad \forall \kappa \in \{1, \dots, K\}, \quad (5.89)$$

$$\tilde{\phi}_\kappa = \phi_0 + \frac{\sum_{\mathbf{r}} \tilde{\zeta}_\kappa(\mathbf{r})}{2}, \quad (5.90)$$

$$\begin{aligned} \tilde{\gamma}_\kappa = \gamma_0 + \frac{1}{2} \sum_{\mathbf{r}} \tilde{\zeta}_\kappa(\mathbf{r}) & \left[|\tilde{m}_x(\mathbf{r})|^2 + \tilde{v}_x(\mathbf{r}) + \tilde{\mathcal{C}}_\kappa(\mathbf{r})(\eta_\kappa^2 + \tilde{\tau}_\kappa) \right. \\ & \left. + \frac{(1 - \tilde{\mathcal{C}}_\kappa(\mathbf{r}))}{2N_{\mathcal{V}}} \sum_{\mathbf{r}' \in \mathcal{V}(\mathbf{r})} |\tilde{m}_x(\mathbf{r}')|^2 + \tilde{v}_x(\mathbf{r}') - 2\Re(\tilde{m}_x^\dagger(\mathbf{r}) \tilde{m}_x^*(\mathbf{r})) \right]. \end{aligned} \quad (5.91)$$

Moyennes des classes η_κ

$$\forall \kappa \in \{1, \dots, K\}, \quad \log(q(\eta_\kappa)) \propto - \left\langle \frac{1}{2} \sum_{\mathbf{r}} \left(\frac{|x(\mathbf{r}) - \eta_\kappa|^2}{\rho_\kappa} \right) + \frac{|\eta_\kappa - \eta_0|^2}{\tau_0} \right\rangle_{q(\mathbf{w})q(\mathbf{x})q(\mathbf{z})\prod_{l \neq \eta_\kappa} q(\psi_l)}. \quad (5.92)$$

Par conséquent, la loi *a posteriori* devient :

$$q(\eta_\kappa) = \mathcal{N}(\tilde{\eta}_\kappa, \tilde{\tau}_\kappa), \quad \forall \kappa \in \{1, \dots, K\}, \quad (5.93)$$

$$\tilde{\tau}_\kappa = \left[\tau_0^{-1} + \overline{\rho_\kappa^{-1}} \sum_{\mathbf{r}} \tilde{\mathcal{C}}_\kappa(\mathbf{r}) \tilde{\zeta}_\kappa(\mathbf{r}) \right]^{-1}, \quad (5.94)$$

$$\tilde{\eta}_\kappa = \tilde{\tau}_\kappa \left[\frac{\eta_0}{\tau_0} + \overline{\rho_\kappa^{-1}} \sum_{\mathbf{r}} \tilde{\mathcal{C}}_\kappa(\mathbf{r}) \tilde{\zeta}_\kappa(\mathbf{r}) \tilde{m}_x(\mathbf{r}) \right]. \quad (5.95)$$

5.5 L'énergie libre \mathcal{F}

L'évaluation de l'énergie libre négative au cours des itérations permet d'avoir un indicateur sur la convergence de l'algorithme. De plus, sa valeur à la convergence permet d'avoir une estimation de l'évidence du modèle. Cette évidence est utile pour le choix de modèle. Nous donnons maintenant les expressions de l'énergie libre dans les cas linéaire et non linéaire.

L'énergie libre dans le cas linéaire s'écrit sous la forme :

$$\mathcal{F}_L(q) = \langle p(\mathbf{y}, \mathbf{x}, \mathbf{z}, \boldsymbol{\psi} | \mathcal{M}) \rangle_q + \mathcal{H}(q(\mathbf{x}, \mathbf{z}, \boldsymbol{\psi})), \quad (5.96)$$

où

$$\begin{aligned} \left\langle p(\mathbf{y}, \mathbf{x}, \mathbf{z}, \boldsymbol{\psi} | \mathcal{M}) \right\rangle_q &= -\frac{M + N + K}{2} \log(2\pi) + (\phi_\epsilon - 1) \log(\gamma_\epsilon) - \Gamma(\phi_\epsilon) \\ &+ K(\phi_0 - 1) \log(\gamma_0) - K\Gamma(\phi_0) - \frac{M + 2\phi_\epsilon + 2}{2} \left(\Psi(\tilde{\gamma}_\epsilon) - \log(\tilde{\phi}_\epsilon) \right) - \gamma_\epsilon \overline{\rho_\epsilon^{-1}} \\ &- \sum_{\kappa} \left[\frac{2\phi_0 + 2 + \sum_{\mathbf{r}} \tilde{\zeta}_\kappa(\mathbf{r})}{2} \left(\Psi(\tilde{\gamma}_\kappa) - \log(\tilde{\phi}_\kappa) \right) + \gamma_0 \overline{\rho_\kappa^{-1}} \right] \\ &- \sum_{\kappa} \frac{\tilde{\eta}_\kappa^2 + \tilde{\tau}_\kappa + \eta_0^2 - 2\tilde{\eta}_\kappa \eta_0}{2\tau_0} + \Upsilon \sum_{\mathbf{r}} \sum_{\kappa} \tilde{\zeta}_\kappa(\mathbf{r}) \sum_{\mathbf{r}' \in \mathcal{V}(\mathbf{r})} \tilde{\zeta}_\kappa(\mathbf{r}') \\ &- \frac{\overline{\rho_\epsilon^{-1}}}{2} \left(\|\mathbf{y}\|_2^2 + \|\mathbf{H}\tilde{\mathbf{m}}_x\|_2^2 - 2\mathbf{y}^t \mathbf{H}\tilde{\mathbf{m}}_x + \left\| \tilde{\mathbf{V}}_x \Gamma^{\mathbf{H}} \right\|_1 + \left\| \Gamma^{\mathbf{H}} \circ (\tilde{\mathbf{m}}_{x2} - \tilde{\mathbf{m}}_x^2) \right\|_1 \right) \\ &- \sum_{\mathbf{r}} \sum_{\kappa} \frac{\overline{\rho_\kappa^{-1}} \tilde{\zeta}_\kappa(\mathbf{r}) \left(|\tilde{m}_{x,\kappa}(\mathbf{r})|^2 + \tilde{v}_{x,\kappa}(\mathbf{r}) + \tilde{m}_{x2,\kappa}^\dagger(\mathbf{r}) - 2\tilde{m}_{x,\kappa}(\mathbf{r}) \tilde{m}_{x,\kappa}^\dagger(\mathbf{r}) \right)}{2} \end{aligned} \quad (5.97)$$

et

$$\begin{aligned} \mathcal{H}(q(\mathbf{x}, \mathbf{z}, \boldsymbol{\psi})) &= \sum_{\kappa} \sum_{\mathbf{r}} \left(\frac{\tilde{\zeta}_\kappa(\mathbf{r})}{2} \log(2\pi e \tilde{v}_{x,\kappa}(\mathbf{r})) \right) + \tilde{\gamma}_\kappa + \log(\tilde{\phi}_\kappa \Gamma(\tilde{\gamma}_\kappa)) - (1 + \tilde{\gamma}_\kappa) \Psi(\tilde{\gamma}_\kappa) \\ &+ \sum_{\mathbf{r}} \sum_{\kappa} \tilde{\zeta}_\kappa(\mathbf{r}) \left(\Upsilon \sum_{\mathbf{r}' \in \mathcal{V}(\mathbf{r})} \tilde{\zeta}_\kappa(\mathbf{r}') - \log \left(\sum_{\kappa} \exp \left(\Upsilon \sum_{\mathbf{r}' \in \mathcal{V}(\mathbf{r})} \tilde{\zeta}_\kappa(\mathbf{r}') \right) \right) \right) \\ &+ \sum_{\kappa} \log \left(\sqrt{2\pi e \tilde{\tau}_\kappa} \right) + \tilde{\gamma}_\epsilon + \log(\tilde{\phi}_\epsilon \Gamma(\tilde{\gamma}_\epsilon)) - (1 + \tilde{\gamma}_\epsilon) \Psi(\tilde{\gamma}_\epsilon), \end{aligned} \quad (5.98)$$

où

$$\tilde{m}_{x^2,\kappa}^\dagger(\mathbf{r}) = \frac{1 - \tilde{\mathcal{C}}_\kappa(\mathbf{r})}{2N_{\mathcal{V}}} \sum_{\mathbf{r}' \in \mathcal{V}(\mathbf{r})} (|\tilde{m}_x(\mathbf{r}')|^2 + \tilde{v}_x(\mathbf{r}')) + \tilde{\mathcal{C}}_\kappa(\mathbf{r}) (\tilde{\eta}_\kappa^2 + \tilde{\tau}_\kappa). \quad (5.99)$$

Dans le cas non linéaire, on trouve :

$$\mathcal{F}_{NL}(q) = \langle p(\mathbf{y}, \mathbf{w}, \mathbf{x}, \mathbf{z}, \boldsymbol{\psi} | \mathcal{M}) \rangle_q + \mathcal{H}(q(\mathbf{w}, \mathbf{x}, \mathbf{z}, \boldsymbol{\psi})) \quad (5.100)$$

où

$$\begin{aligned} \mathcal{H}(q(\mathbf{w}, \mathbf{x}, \mathbf{z}, \boldsymbol{\psi})) = & \sum_{N_v} \sum_{N_f} \sum_{N_P} \sum_{\mathbf{r}} \sum_{\kappa} \log \left(\sqrt{2\pi e \tilde{v}_w(\mathbf{r})} \right) + \sum_{\mathbf{r}} \sum_{\kappa} \log \left(\sqrt{2\pi e \tilde{v}_x(\mathbf{r})} \right) \\ & + \sum_{\mathbf{r}} \sum_{\kappa} \tilde{\zeta}_\kappa(\mathbf{r}) \left(\Upsilon \sum_{\mathbf{r}' \in \mathcal{V}(\mathbf{r})} \tilde{\zeta}_\kappa(\mathbf{r}') - \log \left(\sum_{\kappa} \exp \left(\Upsilon \sum_{\mathbf{r}' \in \mathcal{V}(\mathbf{r})} \tilde{\zeta}_\kappa(\mathbf{r}') \right) \right) \right) \\ & + \sum_{\kappa} \log \left(\sqrt{2\pi e \tilde{\tau}_\kappa} \right) + \sum_{\kappa} \left(\tilde{\gamma}_\kappa + \log \left(\tilde{\phi}_\kappa \Gamma(\tilde{\gamma}_\kappa) \right) - (1 + \tilde{\gamma}_\kappa) \Psi(\tilde{\gamma}_\kappa) \right) + \tilde{\gamma}_\epsilon \\ & + \log \left(\tilde{\phi}_\epsilon \Gamma(\tilde{\gamma}_\epsilon) \right) - (1 + \tilde{\gamma}_\epsilon) \Psi(\tilde{\gamma}_\epsilon) + \tilde{\gamma}_\xi + \log \left(\tilde{\phi}_\xi \Gamma(\tilde{\gamma}_\xi) \right) - (1 + \tilde{\gamma}_\xi) \Psi(\tilde{\gamma}_\xi) \end{aligned} \quad (5.101)$$

et

$$\begin{aligned} \left\langle p(\mathbf{y}, \mathbf{w}, \mathbf{x}, \mathbf{z}, \boldsymbol{\psi} | \mathcal{M}) \right\rangle_q = & -\frac{M + N(1 + N_v N_P N_f) + K}{2} \log(2\pi) \\ & + (\phi_\epsilon - 1) \log(\gamma_\epsilon) - \Gamma(\phi_\epsilon) - \frac{M + 2\phi_\epsilon + 2}{2} \left(\Psi(\tilde{\gamma}_\epsilon) - \log(\tilde{\phi}_\epsilon) \right) - \gamma_\epsilon \overline{\rho_\epsilon^{-1}} \\ & + (\phi_\xi - 1) \log(\gamma_\xi) - \Gamma(\phi_\xi) - \frac{N N_v N_P N_f + 2\phi_\xi + 2}{2} \left(\Psi(\tilde{\gamma}_\xi) - \log(\tilde{\phi}_\xi) \right) - \gamma_\xi \overline{\rho_\xi^{-1}} \\ & + \log \left(\gamma_0^{K(\phi_0-1)} \right) - \sum_{\kappa} \frac{\left(2\phi_0 + 2 + \sum_{\mathbf{r}} \tilde{\zeta}_\kappa(\mathbf{r}) \right) \left(\Psi(\tilde{\gamma}_\kappa) - \log(\tilde{\phi}_\kappa) \right) - 2\gamma_0 \overline{\rho_\kappa^{-1}}}{2} \\ & - K\Gamma(\phi_0) - \sum_{\kappa} \frac{\tilde{\eta}_\kappa^2 + \tilde{\tau}_\kappa + \eta_0^2 - 2\tilde{\eta}_\kappa \eta_0}{2\tau_0} + \Upsilon \sum_{\mathbf{r}} \sum_{\kappa} \tilde{\zeta}_\kappa(\mathbf{r}) \sum_{\mathbf{r}' \in \mathcal{V}(\mathbf{r})} \tilde{\zeta}_\kappa(\mathbf{r}') \\ & - \frac{\overline{\rho_\epsilon^{-1}}}{2} \left(\|\mathbf{y}\|_2^2 + \|\mathbf{G}^o \tilde{\mathbf{m}}_w\|_2^2 - 2\mathbf{y}^t \mathbf{G}^o \tilde{\mathbf{m}}_w + \|\tilde{\mathbf{V}}_w \Gamma^o\|_1 \right) \\ & - \frac{\overline{\rho_\xi^{-1}}}{2} \left(\|\tilde{\mathbf{m}}_w\|_2^2 + \|\tilde{\mathbf{V}}_w\|_1 + \left\| \left(\tilde{\mathbf{M}}_x + \tilde{\mathbf{V}}_x \right) \overline{\mathbf{E}^2} \right\|_1 - 2\tilde{\mathbf{m}}_x^H \overline{\mathbf{w} \circ \mathbf{E}^*} \right) \\ & - \sum_{\mathbf{r}} \sum_{\kappa} \frac{\overline{\rho_\kappa^{-1}} \tilde{\zeta}_\kappa(\mathbf{r}) \left(|\tilde{m}_x(\mathbf{r})|^2 + \tilde{v}_x(\mathbf{r}) + \tilde{m}_{x^2}^\dagger(\mathbf{r}) - 2\tilde{m}_x(\mathbf{r}) \tilde{m}_{x^2}^\dagger(\mathbf{r}) \right)}{2}, \end{aligned} \quad (5.102)$$

où

$$\tilde{m}_{x^2}^\dagger(\mathbf{r}) = \frac{1 - \tilde{\mathcal{C}}_\kappa(\mathbf{r})}{2N_{\mathcal{V}}} \sum_{\mathbf{r}' \in \mathcal{V}(\mathbf{r})} (|\tilde{m}_x(\mathbf{r}')|^2 + \tilde{v}_x(\mathbf{r}')) + \tilde{\mathcal{C}}_\kappa(\mathbf{r}) (\tilde{\eta}_\kappa^2 + \tilde{\tau}). \quad (5.103)$$

Les expressions des énergies libres sont données sans les fonctions de partition des champs markoviens des modèles. Nous remarquons que le calcul de l'énergie libre dépend principalement des termes utilisés pour la mise à jour des valeurs des paramètres et son évaluation ne demande pas de coût supplémentaire.

5.6 Mise en œuvre

La recherche de la meilleure loi séparable qui approche la vraie loi *a posteriori* conduit à une loi dont les paramètres sont mutuellement dépendants. Alors, le problème d'optimisation fonctionnelle se transforme en un problème paramétrique itératif. On présente le schéma général de mise en œuvre dans les cas linéaire et non linéaire. À partir des valeurs des paramètres à l'itération $n - 1$, on peut calculer les nouvelles valeurs de la manière suivante :

1. mise à jour de $\tilde{\mathbf{V}}_x$ puis $\tilde{\mathbf{m}}_x$ à partir des équations 5.30 et 5.31,
2. mise à jour de $\tilde{\boldsymbol{\zeta}}_\kappa$ à partir de l'équation 5.33,
3. mise à jour de $\tilde{\gamma}_\epsilon$ et $\tilde{\phi}_\epsilon$ à partir des équations 5.36 et 5.35,
4. mise à jour de $\tilde{\gamma}_\kappa$ et $\tilde{\phi}_\kappa$ à partir des équations 5.43 et 5.42,
5. mise à jour de $\tilde{\tau}_\kappa$ puis $\tilde{\eta}_\kappa$ à partir des équations 5.47 et 5.48,
6. évaluation de l'énergie libre négative $\mathcal{F}_L(q)$ donnée par l'équation 5.96.

De la même manière, on obtient, dans le cas non linéaire, les nouvelles valeurs des paramètres :

1. mise à jour de $\tilde{\mathbf{V}}_w$ puis $\tilde{\mathbf{m}}_w$ à partir des équations 5.66 et 5.67,
2. mise à jour de $\tilde{\mathbf{V}}_x$ puis $\tilde{\mathbf{m}}_x$ à partir des équations 5.76 et 5.77,
3. mise à jour de $\tilde{\boldsymbol{\zeta}}_\kappa$ à partir de l'équation 5.80,
4. mise à jour de $\tilde{\gamma}_\epsilon$ et $\tilde{\phi}_\epsilon$ à partir des équations 5.84 et 5.83,
5. mise à jour de $\tilde{\gamma}_\xi$ et $\tilde{\phi}_\xi$ à partir des équations 5.87 et 5.86,
6. mise à jour de $\tilde{\gamma}_\kappa$ et $\tilde{\phi}_\kappa$ à partir des équations 5.91 et 5.90,
7. mise à jour de $\tilde{\tau}_\kappa$ puis $\tilde{\eta}_\kappa$ à partir des équations 5.94 et 5.95,
8. évaluation de l'énergie libre négative $\mathcal{F}_{NL}(q)$ donnée par l'équation 5.100.

5.7 Discussion

Nous avons présenté dans ce chapitre l'approche bayésienne variationnelle qui permet d'approximer analytiquement la loi *a posteriori* par une loi séparable. Deux choix de séparation de la loi approchante sont étudiés. Les expressions des paramètres de forme des lois séparables sont obtenues dans les cas linéaire et non linéaire. On remarque que les expressions de mise à jour des paramètres de ces lois ressemblent à celles qui seraient obtenues si une méthode de type gradient avait été utilisée pour résoudre le problème d'optimisation (cf. annexe C.5, [Sat01]). De plus, le gradient et le pas de mise à jour ont un sens en termes de moments probabilistes (moyenne, variance, ...). En outre, nous avons calculé les expressions de l'énergie libre négative qui permet d'approcher l'évidence pour le problème du choix de modèle.

Nous testons dans le chapitre suivant les deux approches proposées dans ce travail avec des données simulées et expérimentales correspondant à trois applications : la tomographie X, la tomographie optique de diffraction et l'imagerie micro-onde 3D.

6

Applications et résultats

6.1 Introduction

Nous présentons, dans cette partie, les résultats de reconstruction des méthodes proposées dans cette thèse. Pour cet objectif, nous avons utilisé des données simulées et des données expérimentales provenant de l'Institut Fresnel à Marseille. Nous comparons les résultats obtenus avec les méthodes de reconstruction conventionnelles à ceux obtenus avec les deux méthodes d'approximation de la loi *a posteriori*, l'approche bayésienne variationnelle et l'échantillonnage de Gibbs, du point de vue qualité de reconstruction et temps de calcul.

Nous commençons par une description de la configuration de mesure pour les trois applications traitées ici : la tomographie X, la tomographie optique de diffraction et l'imagerie micro-onde. Ensuite, nous donnons les résultats de reconstruction pour chaque application et les valeurs des constantes des modèles (méta-hyper-paramètres). Nous terminons le chapitre par une discussion sur la qualité de reconstruction et le temps de calcul.

6.2 Configurations de mesure

6.2.1 Tomographie X

Pour cette première application, nous avons utilisé des données simulées issues d'un système de tomographie X parallèle 2D (fig. 6.1). Les données (sinogrammes) sont obtenues à partir des projections autour de l'objet. On a utilisé le projecteur de Joseph [Jos82] pour simuler le problème direct. Ensuite, un bruit gaussien centré de variance ρ_ϵ est rajouté pour modéliser les erreurs. Nous avons ensuite testé l'algorithme sur deux ob-

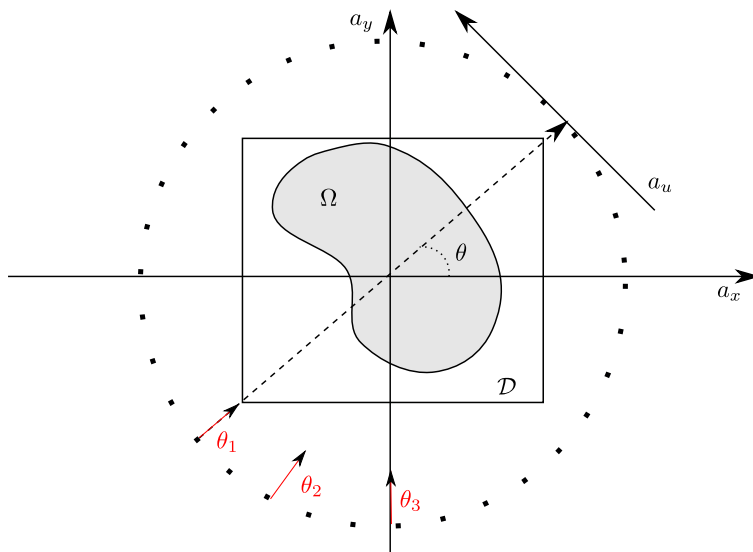
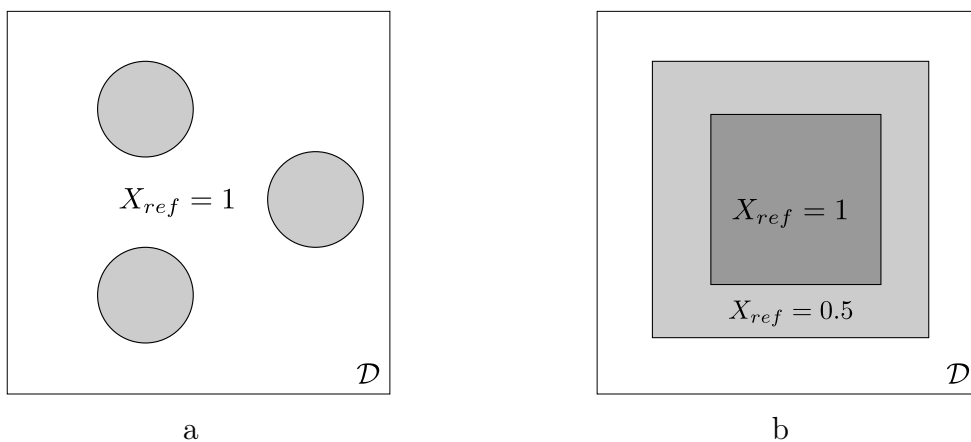


FIGURE 6.1 – La configuration de tomographie X.

jets. Le premier (*3disques*) est composé de trois disques de même contraste ($x_{ref} = 1$). Le deuxième (*2carrés*) est composé de deux carrés : le carré extérieur a un contraste $x_{ref} = 0.5$ et le carré intérieur a un contraste $x_{ref} = 1$.


 FIGURE 6.2 – Les objets tests : a) l'objet *3disques*, b) l'objet *2carrés*.

6.2.2 Tomographie optique de diffraction

Nous utilisons des données expérimentales de l'Institut Fresnel à Marseille (courtoisie de G. Maire, A. Sentenac et K. Belkebir) [MDG⁺09]. Les objets à examiner sont décrits sur la figure 6.4. Ils sont faits de pistes de résine parallèles placées sur un substrat de silicium. Le substrat est de permittivité relative connue et ses dimensions sont grandes par rapport à celle des pistes de résine, de sorte que la configuration est modélisée comme suit : un objet en résine réside dans la couche supérieure d'un milieu stratifié constitué de deux demi-espaces semi-infinis séparés par une interface plane γ_{12} . Le demi-espace

supérieur \mathcal{D}_1 est constitué d'air et le demi-espace inférieur \mathcal{D}_2 est constitué de silicium. Les différents milieux sont considérés comme étant sans pertes et ils sont caractérisés par leur constante de propagation k_m , ($m = 1, 2$ ou Ω) telle que $k_m^2 = \omega^2 \varepsilon_0 \varepsilon_m \mu_0$, où ω est la fréquence angulaire, ε_0 ($\varepsilon_0 = 8.854 \times 10^{-12}$ F/m) et μ_0 ($\mu_0 = 4\pi \times 10^{-7}$ H/m) sont la permittivité diélectrique et la perméabilité magnétique du vide, respectivement, et ε_m est la permittivité diélectrique relative du milieu de \mathcal{D}_m ($\varepsilon_1 = 1$, $\varepsilon_2 = 15.07$).

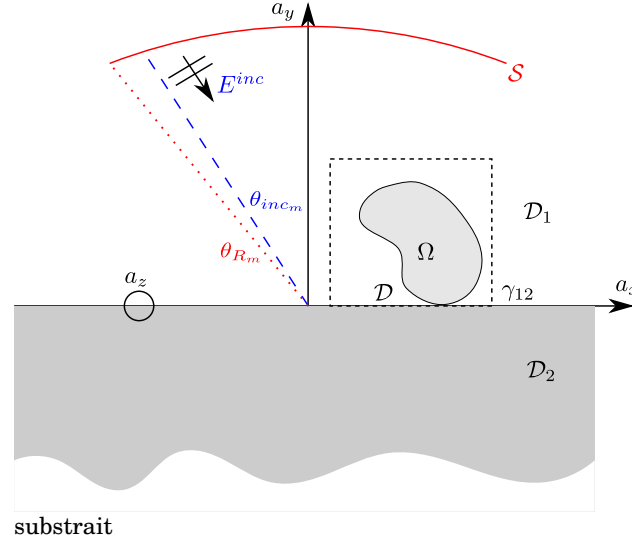


FIGURE 6.3 – L'exemple du milieu stratifié traité dans ce travail

L'objet est situé dans un domaine test $\mathcal{D} \subset \mathcal{D}_1$. La fonction de contraste χ dépend de ses paramètres électromagnétiques : $\chi(\mathbf{r}) = k^2(\mathbf{r}) - k_1^2$. Elle est définie dans \mathcal{D} et nulle en dehors de Ω . L'objet est éclairé par une onde incidente générée par un laser hélium-néon, opérant à une longueur d'onde de 633 nm, couplé à un microscope fonctionnant en réflexion et équipé d'un dispositif de mesure interférométrique permettant des mesures précises de la phase des champs diffractés. L'onde incidente, dont la dépendance temporelle implicite est choisie en $\exp(-i\omega t)$, peut être considérée comme une onde plane dont le champ électrique E^{inc} est polarisé dans le plan d'interface γ_{12} selon l'axe a_z . Sous l'hypothèse que l'objet n'est pas dépolarisant, la configuration de mesure est considérée comme une configuration 2D dans un cas de polarisation transverse magnétique (TM), ce qui conduit à des formulations scalaires. La direction de propagation de l'onde incident θ_1 est incluse dans l'intervalle $\pm 32^\circ$; N_v vues sont effectuées à différents θ_1 , chaque vue étant constituée de mesures du champ diffracté dans le domaine de champ lointain \mathcal{S} à N_R angles d'observation θ différents dans le secteur $\pm 46^\circ$.

L'objet *2pistes* est composé de deux pistes de hauteur $0.14\mu\text{m}$ et de largeurs $1\mu\text{m}$ et $0.5\mu\text{m}$, respectivement, avec $0.5\mu\text{m}$ de distance entre elles. L'objet *3pistes* est composé de trois pistes de hauteur 110nm et de largeur $0.2\mu\text{m}$, avec $0.3\mu\text{m}$ de distance entre elles. Le contraste des deux objets est $X_{ref} = 1.66$.

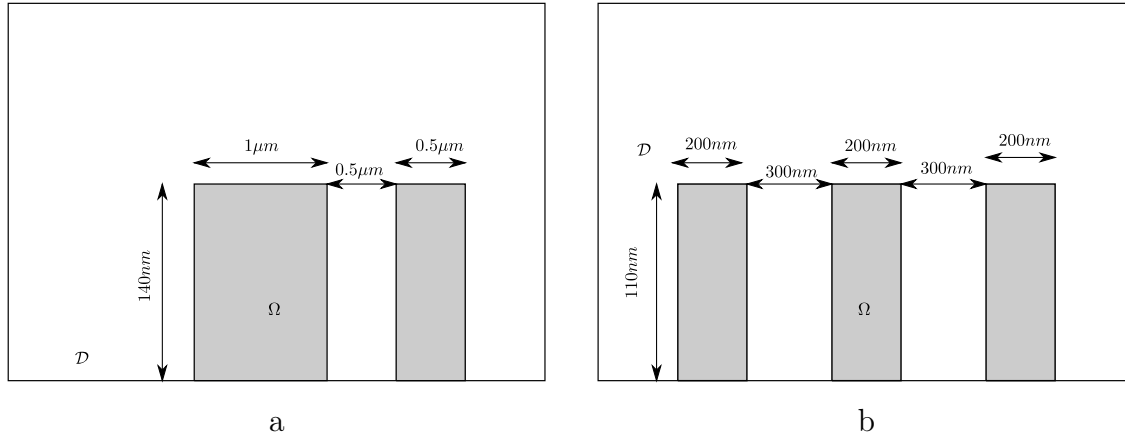


FIGURE 6.4 – Les objets tests en tomographie optique de diffraction : a) l'objet *2pistes*, b) l'objet *3pistes*.

6.2.3 Imagerie micro-onde 3D

Pour l'application en imagerie micro-onde 3D, nous avons utilisé des données simulées et des données expérimentales venant de l'Institut Fresnel [GS09]. L'objet sous test est placé dans une chambre anéchoïque, de dimensions $(14.5 \times 6.5 \times 6.5) m^3$, placée dans une cage de Faraday, ce qui permet de considérer que l'imagerie se fait dans l'espace libre. L'antenne de réception est positionnée sur un bras tournant autour de l'axe vertical a_z dans le même plan azimutal $a_x a_y$ que la cible. En raison des restrictions provenant de l'existence physique de l'arc, la position de réception angulaire θ_R varie entre $\pm 130^\circ$. Les mesures sont disponibles selon deux polarisations : E_ϕ et E_θ . L'antenne d'émission est fixée sur l'arcade dans le même plan azimutal et peut tourner de 360° autour de l'axe a_z (ϕ_s est entre 0° et 360°). Les fréquences d'illumination sont comprises entre $2GHz$ et $18GHz$. Le rayon du cercle de mesure est $R_s = 1.796m$.

Nous avons testé deux objets : *1sphère* et *2sphère*. L'objet *1sphère* est composé d'une sphère de rayon $7.5cm$ et de contraste $X_{ref} = 1$. L'objet *2sphère* est composé de deux sphères placées sur l'axe a_x et qui se touchent au centre. Le rayon de chaque sphère est $5cm$. Le contraste des deux sphères est $X_{ref} = 1.6$.

6.3 Résultats

Dans cette partie, nous présentons les résultats de reconstruction pour les trois applications traitées dans cette thèse. Nous commençons d'abord par une précision sur les mesures (nombre des points, fréquences, ...) et les valeurs des méta-hyper-paramètres pour chaque méthode d'inversion.

6.3.1 Tomographie X

Nous avons testé dans un premier temps, l'approche bayésienne variationnelle pour l'inversion du modèle linéaire sur l'objet *2carrés*. Le contraste \mathbf{x} est initialisé par rétro-

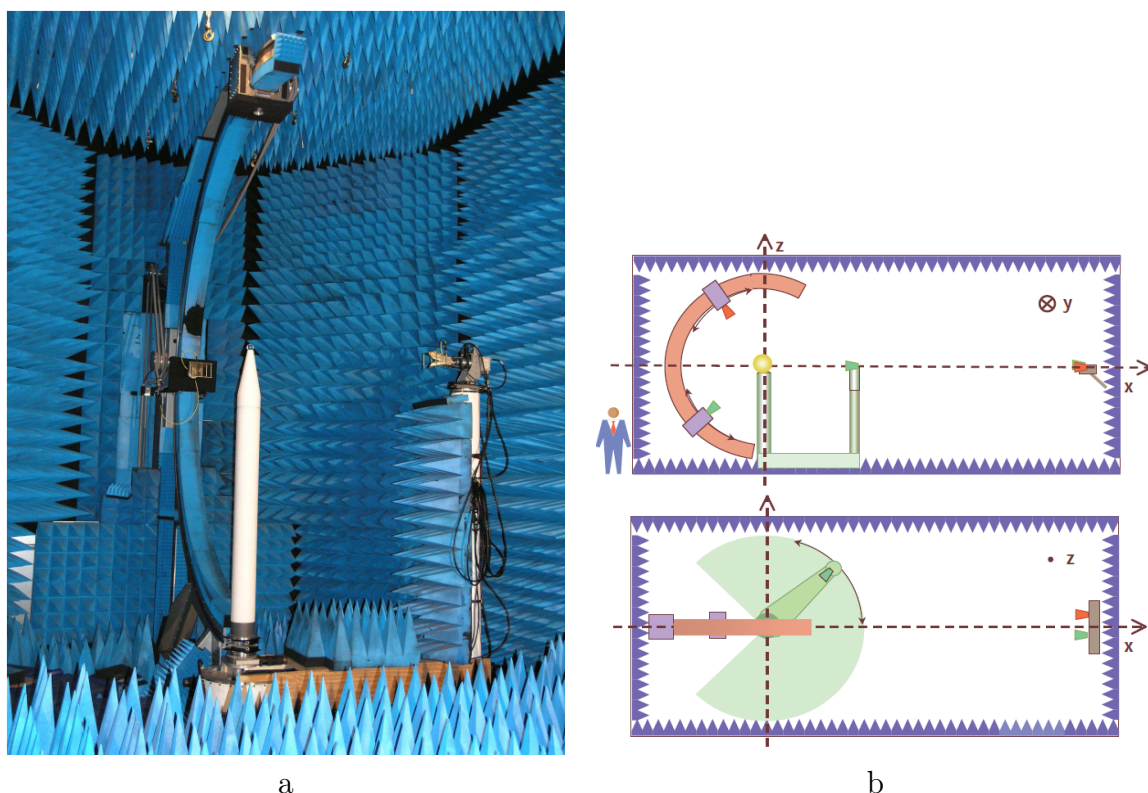


FIGURE 6.5 – Le dispositif expérimental pour l'imagerie micro-onde 3D (source [Eyr06])
 a) photo de la chambre anéchoïque , b) Schéma de la structure : vue latérale - vue du dessus.

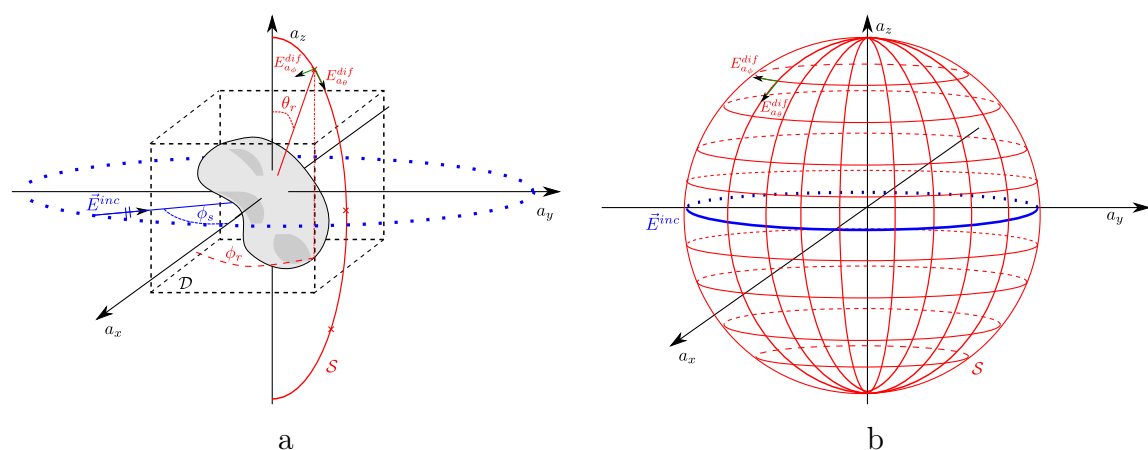


FIGURE 6.6 – Illustration de la configuration de mesure à l'institut Fresnel : a) les notations générales de la configuration, b) les positions de la source et du récepteur : les interactions entre les lignes représente une position de récepteur. Les différentes positions de source sont représentées par le cercle bleu.

projection des données. Ensuite, nous appliquons l'algorithme de *K-means* [Har93] pour obtenir le champ caché z_i , les moyennes des classes η_i et les variances ρ_i . La variance initiale du bruit ρ_{ϵ_i} est estimée d'une manière empirique à partir de la différence entre

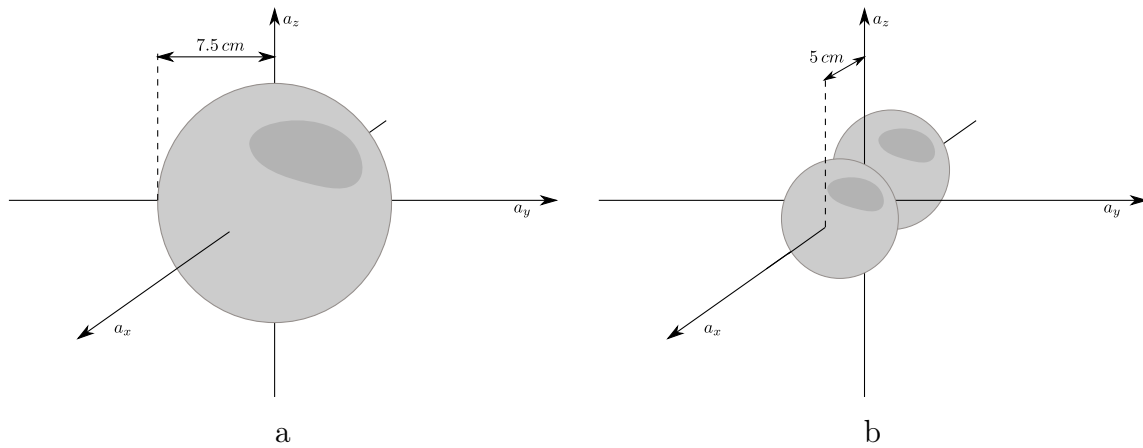


FIGURE 6.7 – Les deux objets utilisés pour tester l’application d’imagerie micro-onde 3D : a) l’objet *1sphère*, b) l’objet *2sphère*.

les données et la sortie modèle pour le contraste initial :

$$\rho_{\epsilon_i} = \frac{1}{N-1} \|\mathbf{y} - \mathbf{H}\mathbf{x}_i\|_2^2. \quad (6.1)$$

Les paramètres de l’algorithme (nombre de projections, nombre de pixels, méta-hyper-paramètres) sont donnés dans le tableau 6.1. Comme indiqué dans le paragraphe 3.3.3, on fixe la valeur du paramètre du champ de Potts Υ proche de la valeur critique Υ_c . De plus, on peut imposer une valeur minimale pour les variances des classes ρ_{min} en choisissant γ_0 et ϕ_0 telle que $\rho_{min} = \frac{\gamma_0}{\phi_0 + \frac{N}{2} - 1}$. Les autres méta-hyper-paramètres sont choisis d’une manière non informative. En pratique, le réglage des méta-hyper-paramètres ne pose pas de difficulté. En effet, nous avons testé plusieurs valeurs sans que cela n’affecte la qualité de la reconstruction.

TABLE 6.1 – Les paramètres de l’algorithme

N	M	ρ_{ϵ}	Υ	η_0	τ_0	γ_0	ϕ_0	γ_{ϵ}	ϕ_{ϵ}	K
64×64	64×64	9	0.5	0.5	10^4	0.01	5	5×10^{-5}	10^{-3}	3

Les résultats de reconstruction de l’algorithme *vbLMGI*, *vbLMGM* et *gbLMGI* sont présentés sur la figure 6.8. Nous montrons le champ caché et l’évolution des hyper-paramètres sur la figure 6.9 pour l’algorithme *vbLMGI*.

Le deuxième objet testé est *3disques*. Nous utilisons la même méthode d’initialisation que celle décrite précédemment. Pour tester le comportement de l’algorithme avec un nombre de classes plus important que le nombre réel, on a fixé le nombre de classes à 3. Les résultats de reconstruction pour l’algorithme *vbLMGI* sont montrés sur la figure 6.10. La comparaison entre la segmentation initiale et la segmentation finale montre que l’algorithme reste avec seulement deux classes au lieu de trois. L’évolution des hyper-paramètres est donnée dans la figure 6.11. On remarque, sur la courbe des moyennes, un saut pour une des classes qui correspond à sa fusion avec la classe de fond.

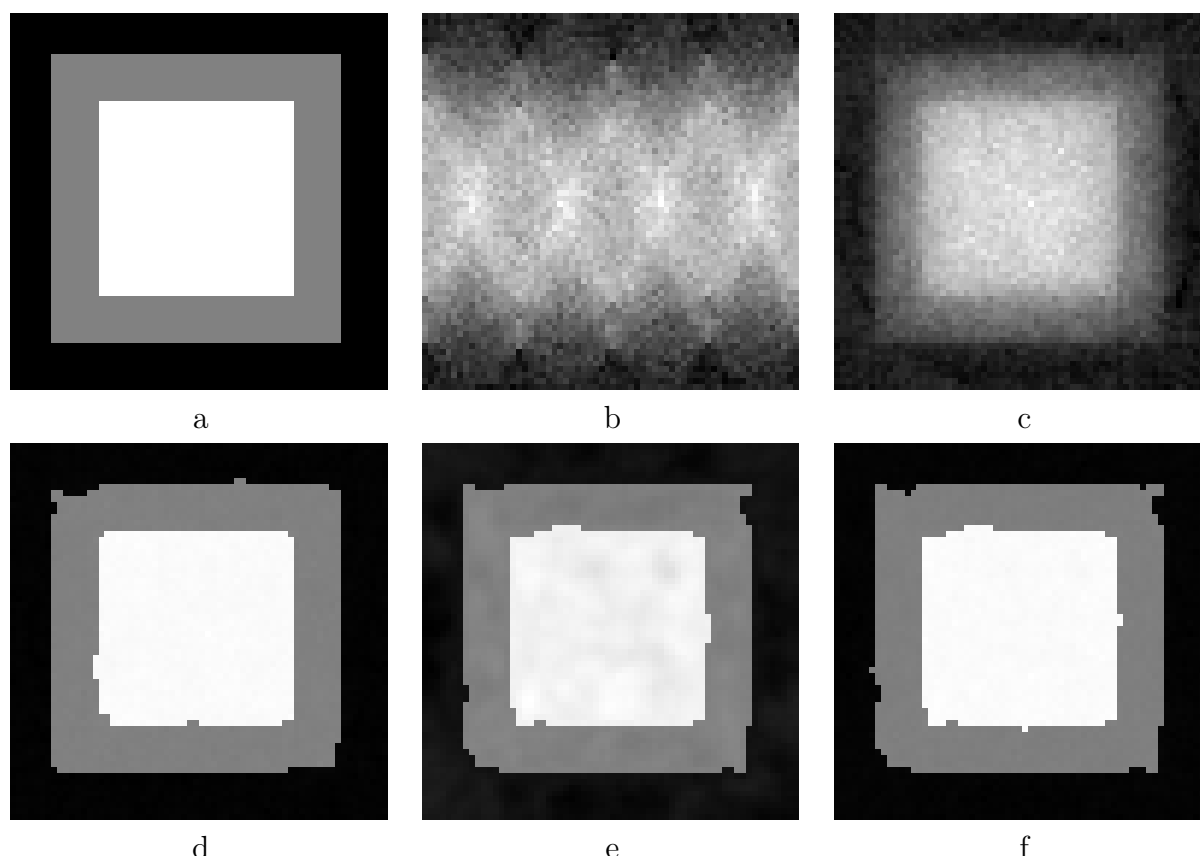


FIGURE 6.8 – Les résultats de reconstruction pour l’objet *2carrés* : a) l’objet original , b) le sinogramme (les données), c) la reconstruction avec l’algorithme de moindres carrés, d) la reconstruction de *vbLMGI*, e) la reconstruction de *vbLMGM*, f) la reconstruction de *gbLMGI*

TABLE 6.2 – Les paramètres de l’algorithme

N	M	ρ_ϵ	Υ	η_0	τ_0	γ_0	ϕ_0	γ_ϵ	ϕ_ϵ	K
64×64	64×64	0.50	0.5	18	10^4	0.01	5	5×10^{-5}	10^{-3}	3

6.3.2 Tomographie optique de diffraction

Nous disposons, pour tester les algorithmes *gbCSMGI* et *vbCSMGI* en tomographie optique de diffraction, des données expérimentales de l’Institut Fresnel. Nous initialisons les algorithmes avec quelques itérations d’un algorithme de contraste-source modifié. Le terme correspondant aux courants \mathbf{w} reste inchangé. Cependant, on modifie le terme de régularisation comme suit :

$$\mathcal{J}(\mathbf{x}) = \|\mathbf{w} - \mathbf{X}\mathbf{E}\|_2^2 + \Lambda_x \|\mathbf{x}\|_2^2. \quad (6.2)$$

Nous avons fixé la constante de régularisation arbitrairement à $\Lambda_x = 0.1 \|\mathbf{E}^o\|_2^2$. À partir de l’estimation initiale des courants \mathbf{w}_i , on obtient la valeur initiale du contraste :

$$\mathbf{x}_i = \frac{\sum_{N_v} \Re(\mathbf{w}_i \circ \mathbf{E}_i^*)}{\sum_{N_v} (\|\mathbf{E}\|_2^2) + \Lambda_x}. \quad (6.3)$$

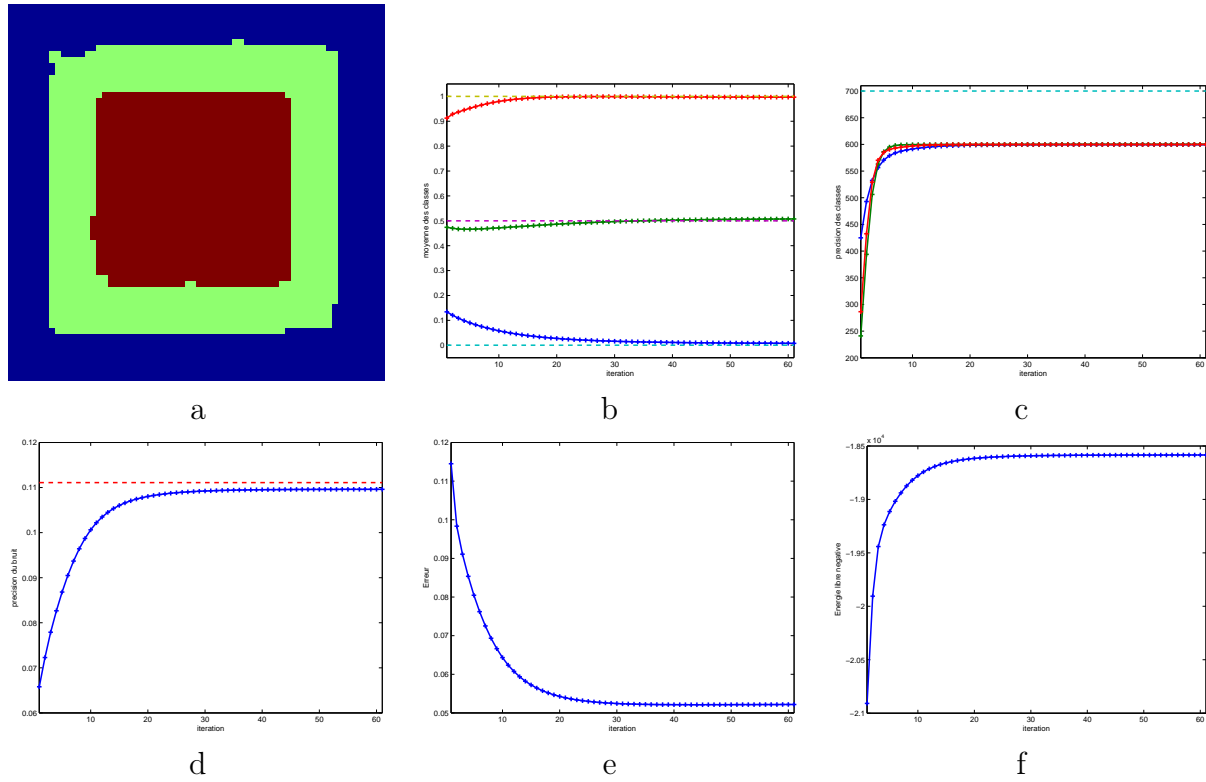


FIGURE 6.9 – L'évolution des hyper-paramètres de l'algorithme *vbLMGI* : a) le champ caché \mathbf{z} , b) les moyennes des classes $\tilde{\eta}_k$, c) les précisions (inverse-variances) des classes $\overline{\rho_k^{-1}}$, d) la précision du bruit $\overline{\rho_\epsilon^{-1}}$, e) l'erreur quadratique relative entre l'objet reconstruit et l'objet original, f) l'énergie libre négative.

Pour le champ caché initial, les moyennes des classes et les variances, on utilise la méthode *k-means*. Finalement, une première estimation des variances des bruits est obtenue d'une manière empirique comme suit :

$$\rho_{\epsilon_i} = \frac{1}{N-1} \|\mathbf{y} - \mathbf{G}^o \mathbf{w}_i\|_2^2, \quad (6.4)$$

$$\rho_{\xi_i} = \frac{1}{N-1} \|\mathbf{w}_i - \mathbf{X}_i \mathbf{E}_i\|_2^2. \quad (6.5)$$

Nous commençons par l'objet composé de deux pistes. Les paramètres de l'algorithme sont donnés dans le tableau 6.3. Nous avons utilisé la méthode de contraste-source modifiée comme méthode conventionnelle de comparaison (fig. 6.12).

TABLE 6.3 – Les paramètres de l'algorithme pour l'objet *2pistes*

N	$M = N_v N_R$	Δ	Υ	η_0	τ_0	γ_0	ϕ_0	γ_ϵ	ϕ_ϵ	γ_ξ	ϕ_ξ	K
512×32	8×611	$7.4nm$	0.7	0.5	10^4	50	10^3	300	10^3	10^9	10^3	2

On remarque les données manquantes pour les angles proches de la réflexion spéculaire à cause du bruit de mesure sur le champ diffracté. Nous comparons les résultats de reconstruction sur la figure 6.13.

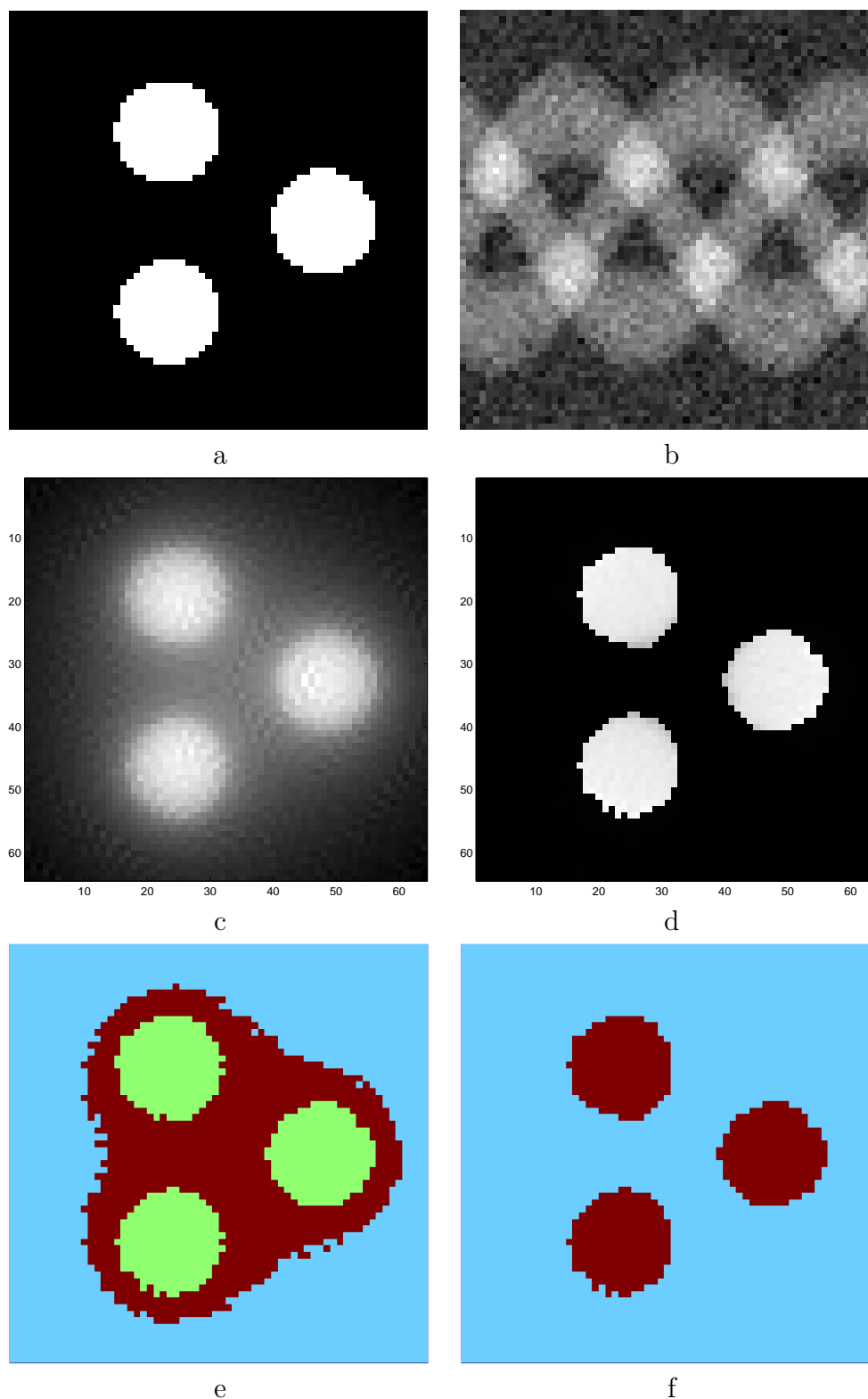


FIGURE 6.10 – Les résultats de reconstruction pour l'objet *3disques* avec l'algorithme *vbLMGI* : a) l'objet original , b) le sinogramme (les données), c) l'initialisation avec la rétro-projection, d) la reconstruction avec *vbLMGI*, e) le champ caché initial, f) le champ caché final.

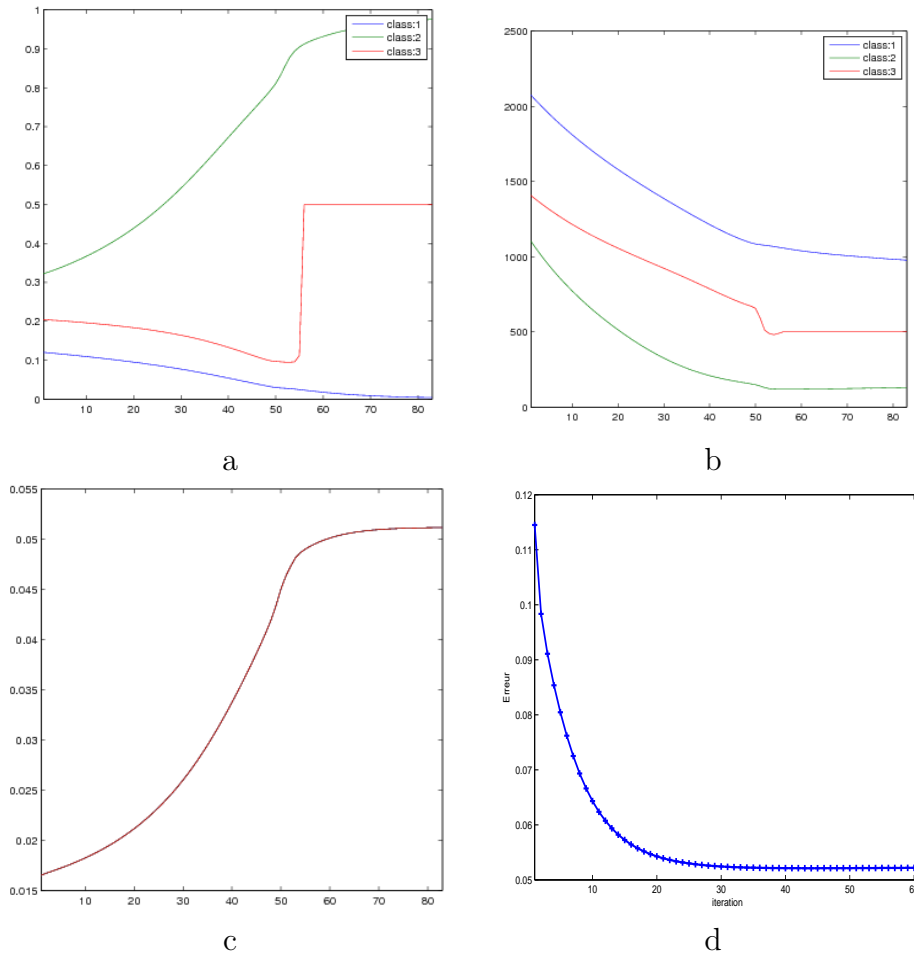


FIGURE 6.11 – L'évolution des hyper-paramètres de l'algorithme *vbLMGI* : a) les moyennes des classes $\tilde{\eta}_\kappa$, b) les précisions (inverse-variances) des classes $\overline{\rho}_\kappa^{-1}$, c) la précision du bruit $\overline{\rho}_\epsilon^{-1}$, d) l'erreur quadratique relative entre l'objet reconstruit et l'objet original.

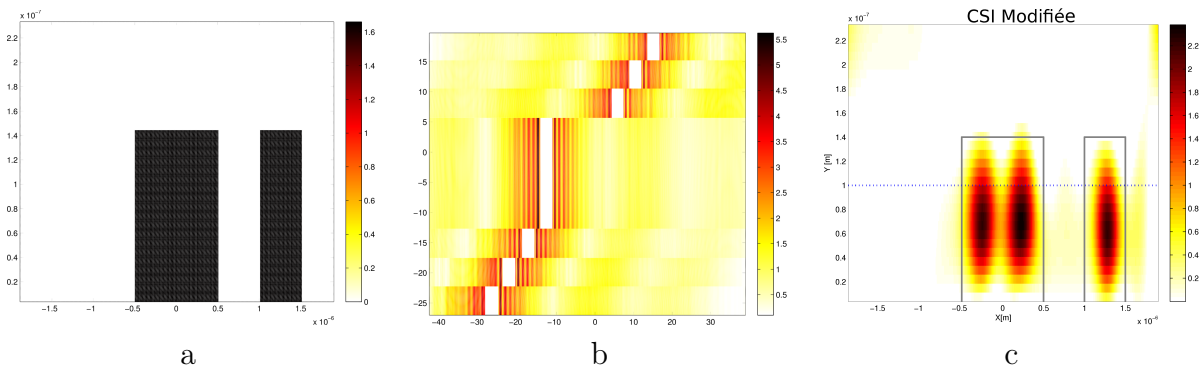


FIGURE 6.12 – L'inversion contraste-source a) le contraste original, b) l'amplitude des données, c) la reconstruction avec la méthode d'inversion contraste-source modifiée.

L'évolution des hyper-paramètres des deux méthodes est décrite sur la figure 6.14 pour *gbCSMGI* et sur la figure 6.15 pour *vbCSMGI*. Nous avons utilisé 500 échantillons

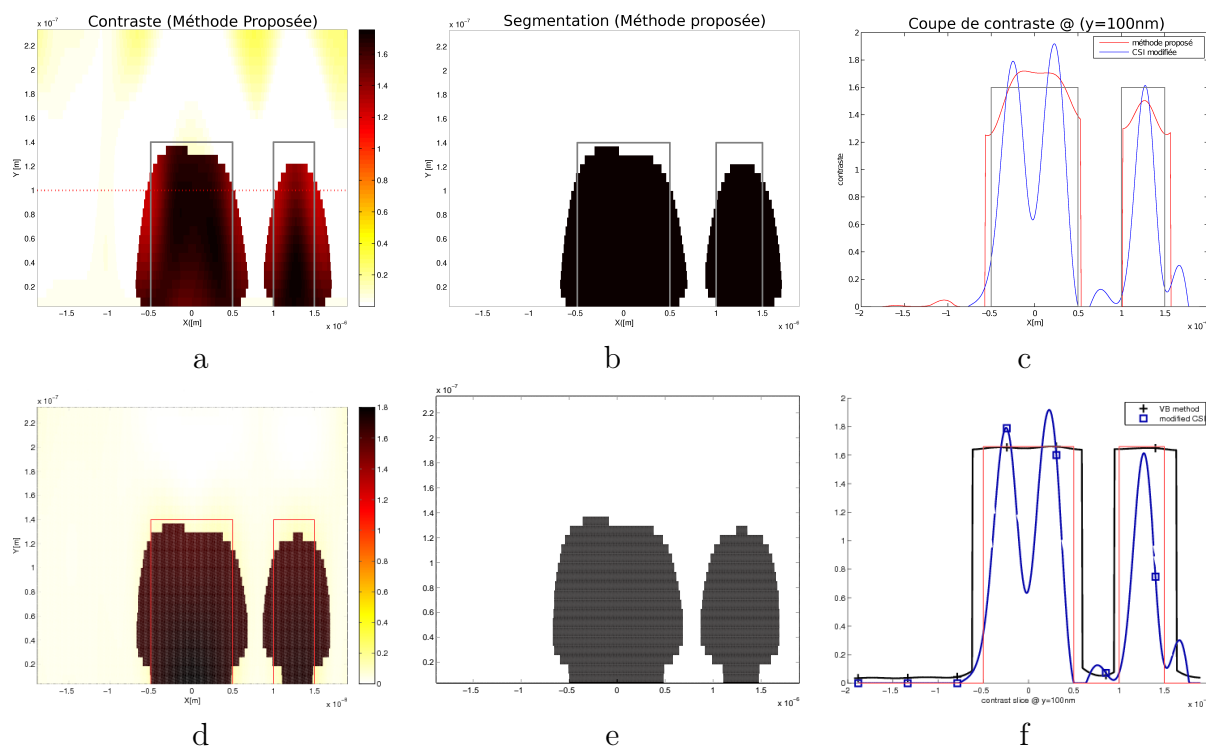


FIGURE 6.13 – Les résultats de reconstruction des méthodes *gbCSMGI* et *vbCSMGI* : a) le contraste estimé par la méthode *gbCSMGI*, b) le champ caché (*gbCSMGI*), c) la coupe à $a_y = 100nm$ pour la reconstruction par la méthode *gbCSMGI* et la méthode conventionnelle, d) le contraste estimé par la méthode *vbCSMGI*, e) le champ caché (*vbCSMGI*), f) la coupe à $a_y = 100nm$ pour la reconstruction par la méthode *vbCSMGI* et la méthode conventionnelle.

pour l'échantillonneur de Gibbs et seulement 100 itérations pour l'approche bayésienne variationnelle.

Nous testons l'objet *3pistes* avec les deux méthodes en utilisant la même méthode d'initialisation que celle décrite précédemment. Les paramètres de l'algorithme sont donnés dans la table 6.4. Les résultats de reconstruction de l'algorithme d'inversion contraste-source modifiée sont présentés sur la figure 6.16.

TABLE 6.4 – Les paramètres de l'algorithme pour l'objet *3pistes*

N	$M = N_v N_R$	Δ	Υ	η_0	τ_0	γ_0	ϕ_0	γ_ϵ	ϕ_ϵ	γ_ξ	ϕ_ξ	K
512×32	10×680	$4.67nm$	0.7	0.5	10^4	50	10^3	300	10^3	10^9	10^3	2

Nous comparons les résultats de reconstruction sur la figure 6.17. L'évolution des hyper-paramètres des deux méthodes est montrée figure 6.18 pour *gbCSMGI* et figure 6.19 pour *vbCSMGI*. Nous avons utilisé 2000 échantillons pour l'échantillonneur de Gibbs pour seulement 400 itérations pour l'approche bayésienne variationnelle.

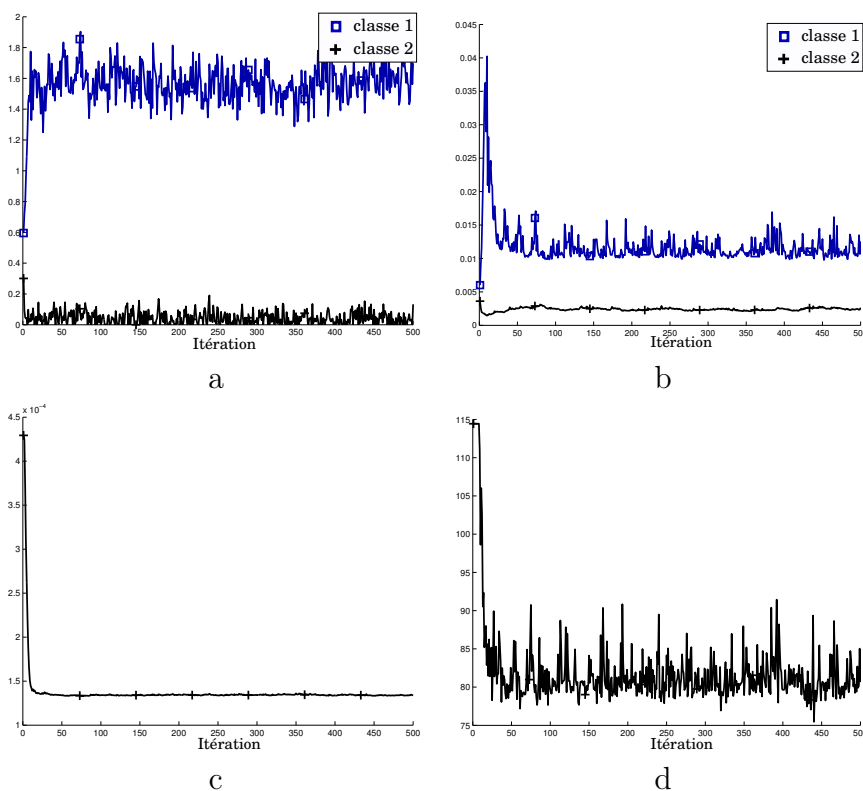


FIGURE 6.14 – L'évolution des hyper-paramètres de l'algorithme *gbCSMGI* pour l'objet *2pistes* : a) les moyennes des classes $\tilde{\eta}_\kappa$, b) les variances des classes $\overline{\rho_\kappa^{-1}}$, c) la variance du bruit d'observation $\overline{\rho_\epsilon^{-1}}$, d) la variance du bruit de couplage $\overline{\rho_\xi^{-1}}$.

6.3.3 Imagerie micro-onde

Nous montrons ici les résultats de reconstruction en imagerie micro-onde par l'algorithme *gbCSMGI*. Nous utilisons des données simulées et expérimentales de l'Institut Fresnel. On initialise l'algorithme avec quelques itérations de la méthode d'inversion contraste-source. Ensuite, la méthode *K – means* est employée pour obtenir le champ caché initial, les moyennes et les variances. Les variances du bruit initiales sont obtenues empiriquement comme suit :

$$\rho_{\epsilon_i} = \frac{1}{N-1} \|\mathbf{y} - \mathbf{G}^o \mathbf{w}_i\|_2^2, \quad (6.6)$$

$$\rho_{\xi_i} = \frac{1}{N-1} \|\mathbf{w}_i - \mathbf{X}_i \mathbf{E}_i\|_2^2. \quad (6.7)$$

Nous commençons par l'objet *1sphère*. Les paramètres de l'algorithme sont donnés dans la table 6.5. Les résultats de reconstruction sont présentés sur la figure 6.20.

L'évolution des hyper-paramètres de l'algorithme est montrée sur la figure 6.21. Nous avons utilisé 500 échantillons pour la reconstruction. Nous continuons avec l'objet *2sphère*. Les paramètres de l'algorithme sont données dans la table 6.6. Les résultats de reconstruction sont montrés sur la figure 6.22.

L'évolution des hyper-paramètres de l'algorithme est montrée sur la figure 6.23. Nous avons utilisé 500 échantillons pour la reconstruction.

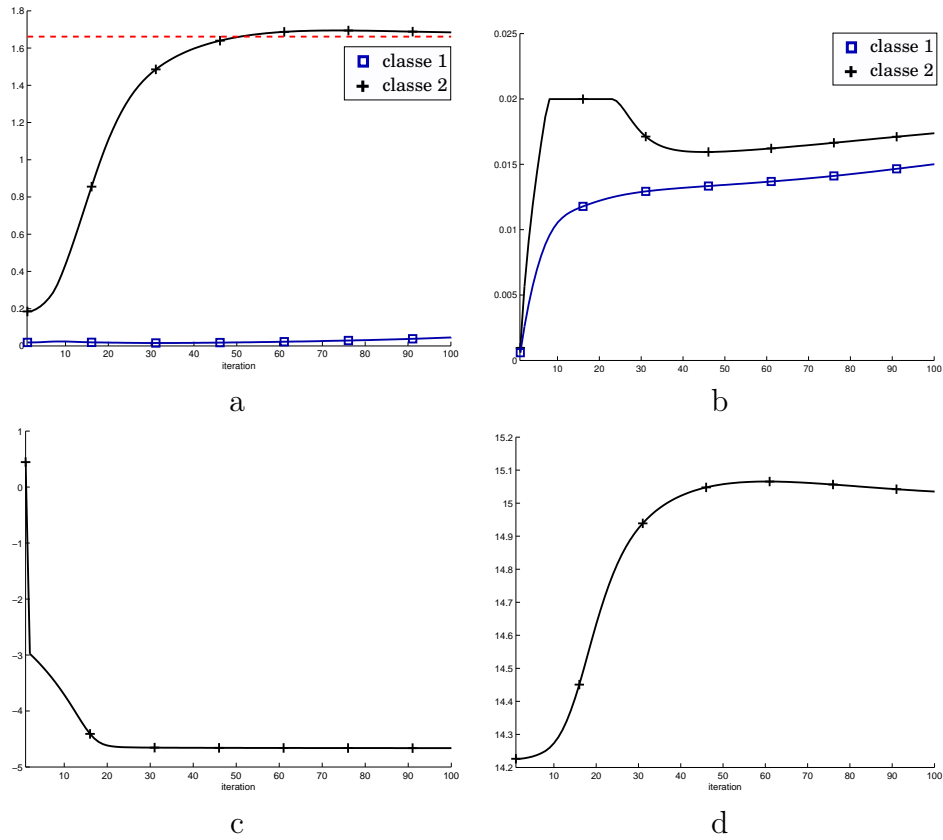


FIGURE 6.15 – L'évolution des hyper-paramètres de l'algorithme *vbLMGI* pour l'objet *2pistes* : a) les moyennes des classes $\tilde{\eta}_\kappa$, b) les variances des classes ρ_κ , c) la variance du bruit d'observation ρ_ϵ (échelle logarithmique), d) la variance du bruit de couplage ρ_ξ .

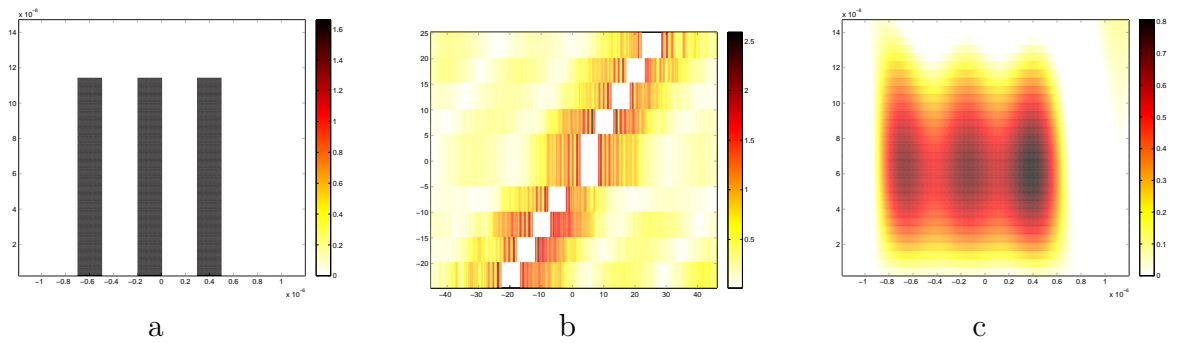


FIGURE 6.16 – a) le contraste original, b) l'amplitude des données, c) la reconstruction avec la méthode d'inversion contraste-source modifiée.

6.4 Discussions

Nous avons testé, dans la partie précédente, les algorithmes de reconstruction proposés dans cette thèse avec des données simulées et expérimentales correspondant à trois applications : la tomographie X, la tomographie optique de diffraction et l'imagerie micro-onde. Nous discutons aussi la performance des ces algorithmes de deux points de

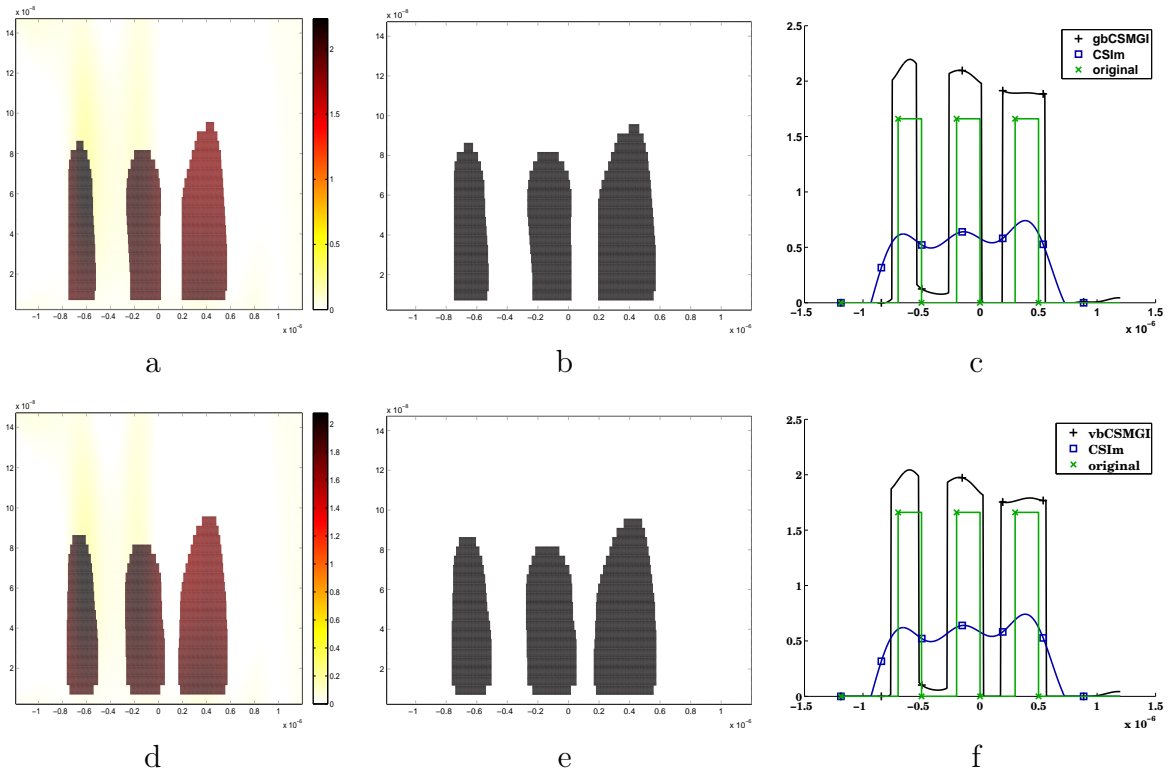


FIGURE 6.17 – Les résultats de reconstruction des méthodes *gbCSMGI* et *vbCSMGI* : a) le contraste estimé par la méthode *gbCSMGI*, b) le champ caché (*gbCSMGI*), c) la coupe à $a_y = 50nm$ pour la reconstruction par la méthode *gbCSMGI* et la méthode conventionnelle, d) le contraste estimé par la méthode *vbCSMGI*, e) le champ caché (*vbCSMGI*), f) la coupe à $a_y = 50nm$ pour la reconstruction par la méthode *vbCSMGI* et la méthode conventionnelle.

TABLE 6.5 – Les paramètres de l'algorithme pour l'objet *1sphère*

N	$M = N_v N_R N_{P_r}$	Δ	f	Υ	η_0	τ_0
$15 \times 15 \times 15$	$36 \times 81 \times 2$	$1cm$	$18GHz$	0.5	0.5	10^4
γ_0	ϕ_0	γ_ϵ	ϕ_ϵ	γ_ξ	ϕ_ξ	K
0.01	5	5×10^{-5}	10^{-3}	5×10^{-5}	10^{-3}	2

TABLE 6.6 – Les paramètres de l'algorithme pour l'objet *2sphères*

N	$M = N_v N_R N_{P_r}$	Δ	f	Υ	η_0	τ_0
$15 \times 15 \times 15$	$36 \times 81 \times 2$	$1cm$	$18GHz$	0.5	0.5	10^4
γ_0	ϕ_0	γ_ϵ	ϕ_ϵ	γ_ξ	ϕ_ξ	K
0.01	5	5×10^{-5}	10^{-3}	5×10^{-5}	10^{-3}	2

vue : la qualité de reconstruction et le temps de calcul. Nous terminons, cette partie en faisant le point sur la question du choix du nombre de classes et l'utilisation de l'énergie libre négative.

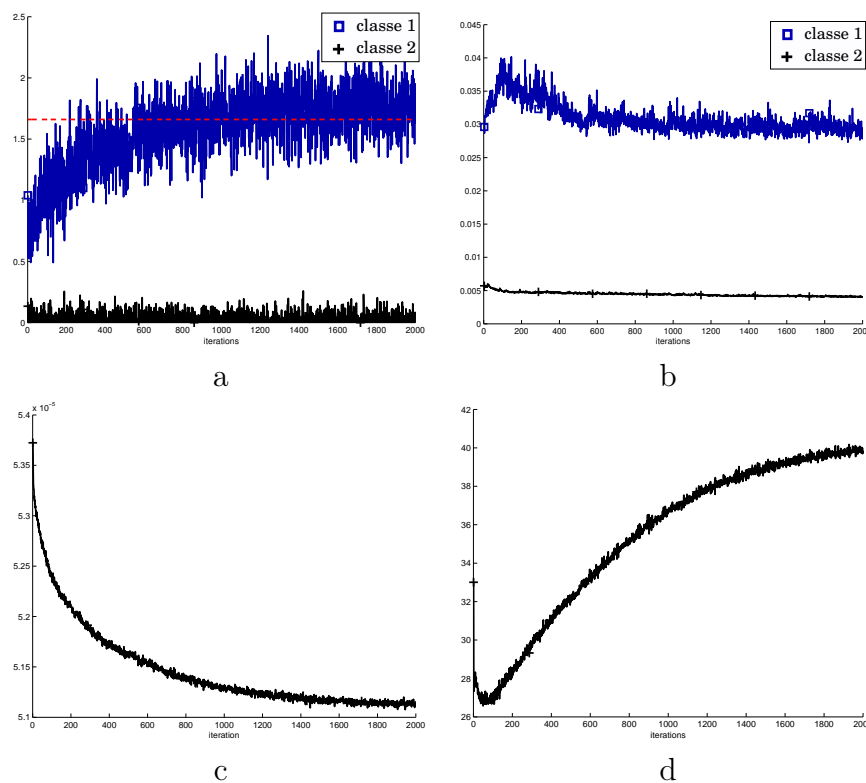


FIGURE 6.18 – L'évolution des hyper-paramètres de l'algorithme *gbCSMGI* pour l'objet *3pistes* : a) les moyennes des classes $\tilde{\eta}_k$, b) les variances des classes ρ_k , c) la variance du bruit d'observation ρ_ϵ , d) la variance du bruit de couplage ρ_ξ .

6.4.1 Qualité de reconstruction

Dans chaque application, nous avons montré les résultats de reconstruction pour les algorithmes basés sur notre modèle *a priori* en utilisant l'échantillonneur de Gibbs ou l'approche bayésienne variationnelle. Nous avons également testé des méthodes conventionnelles pour montrer l'amélioration apportée par notre méthode.

En général, en comparant avec les méthodes conventionnelles, on remarque une amélioration de la qualité de reconstruction en utilisant l'approche bayésienne. Ceci est dû à la prise en compte des informations *a priori* sur l'objet et à l'introduction des modèles de mélange *MGI* ou *MGM*. Ceci peut être constaté qualitativement et quantitativement. De plus, la comparaison entre l'approche bayésienne variationnelle et l'échantillonneur de Gibbs, montre que l'utilisation de l'approche variationnelle donne des résultats de bonne qualité comparables à ceux obtenus avec l'échantillonneur de Gibbs.

Pour la comparaison quantitative des résultats, on a utilisé la fonction d'erreur relative d'ordre 1 :

$$\mathcal{L}_1(\hat{\mathbf{x}}) = -20 \log \left(\frac{\|\mathbf{x} - \hat{\mathbf{x}}\|_1}{\|\mathbf{x}\|_1} \right). \quad (6.8)$$

Ce choix permet d'avoir une "meilleure" estimation de l'erreur de reconstruction car il pénalise moins les pixels mal classés. Nous résumons les différentes erreurs dans la table 6.7.

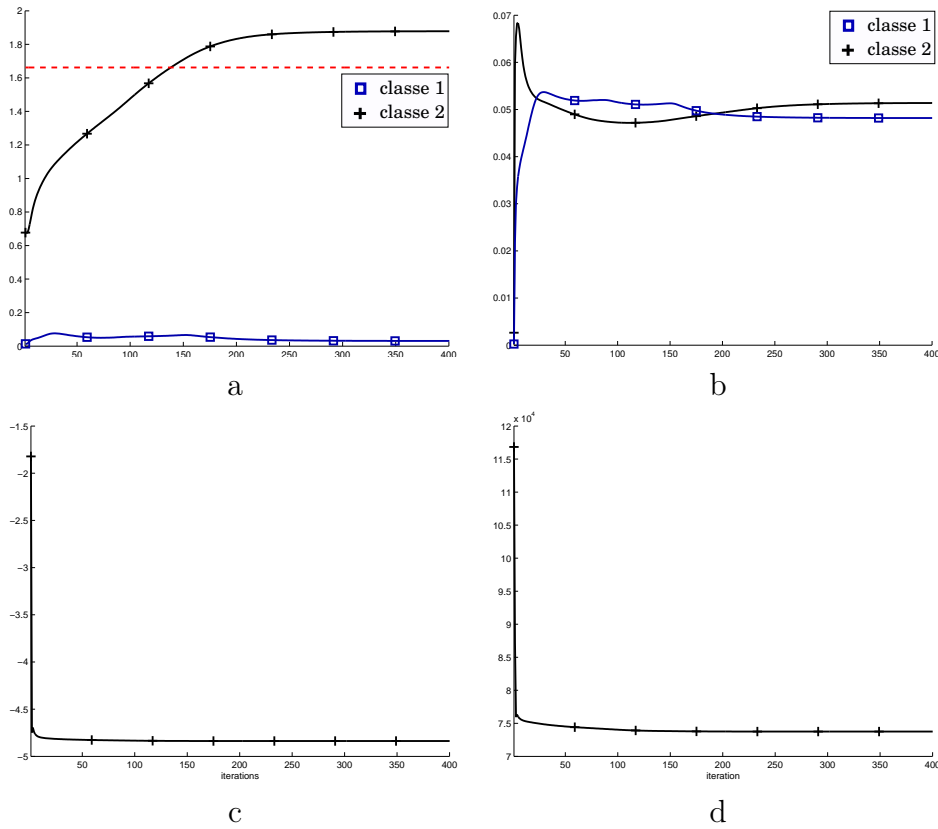


FIGURE 6.19 – L'évolution des hyper-paramètres de l'algorithme *vbLMGI* pour l'objet *3pistes* : a) les moyennes des classes $\tilde{\eta}_\kappa$, b) les variances des classes ρ_κ , c) la variance du bruit d'observation ρ_ϵ (échelle logarithmique), d) la variance du bruit de couplage ρ_ξ .

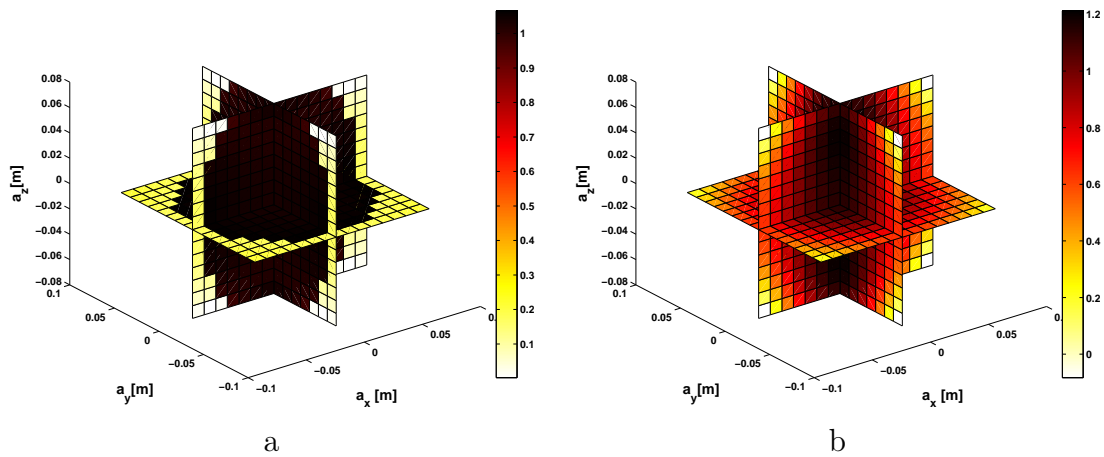


FIGURE 6.20 – Les résultats de reconstruction : a) *gbCSMGI*, b) méthode d'inversion contraste-source .

En comparant les résultats de reconstruction des méthodes basées sur le modèle de mélange de Gauss-Markov *MGM*, on trouve que les classes reconstruites contiennent plus de variations que les résultats obtenus avec le modèle de mélange de gaussiennes indépendantes *MGI*. Ceci est dû à la nature du modèle qui régularise chaque pixel

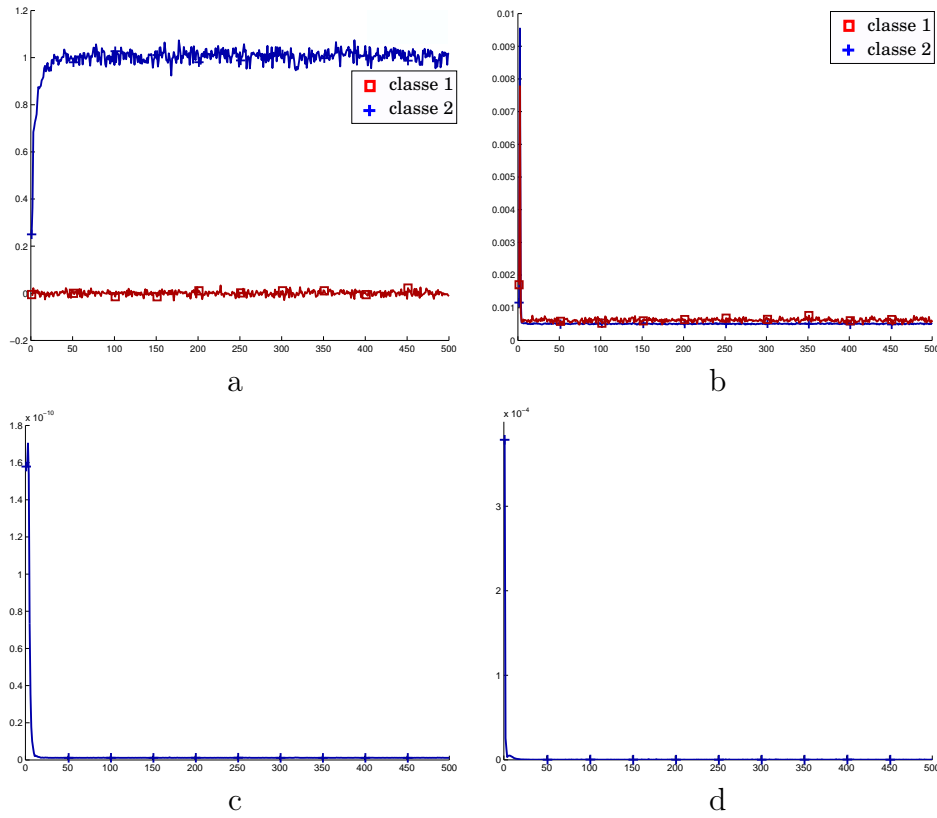


FIGURE 6.21 – L'évolution des hyper-paramètres de l'algorithme *gbLMGI* pour l'objet *1sphère* : a) les moyennes des classes $\tilde{\eta}_\kappa$, b) les variances des classes ρ_κ , c) la variance du bruit d'observation ρ_ϵ , d) la variance du bruit de couplage ρ_ξ .

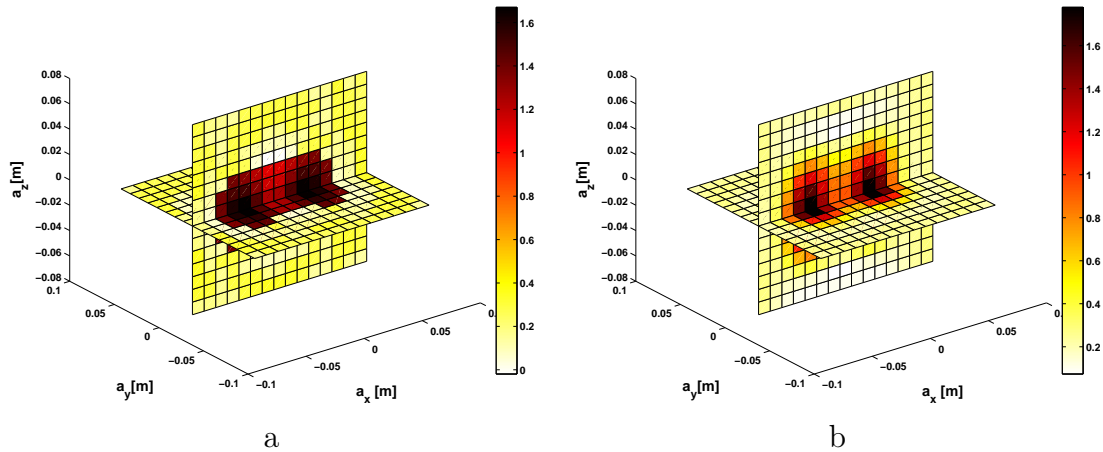


FIGURE 6.22 – Les résultats de reconstruction : a) *gbCSMGI*, b) méthode d'inversion contraste-source .

par rapport aux moyennes des ses proches voisins. Dans les exemples étudiés dans ce travail, nous traitons des objets constants par morceaux, ce qui favorise l'utilisation des méthodes basées sur le modèle *MGI*. Néanmoins nous avons testé le modèle *MGM* pour des applications en restauration d'image dans [A3].

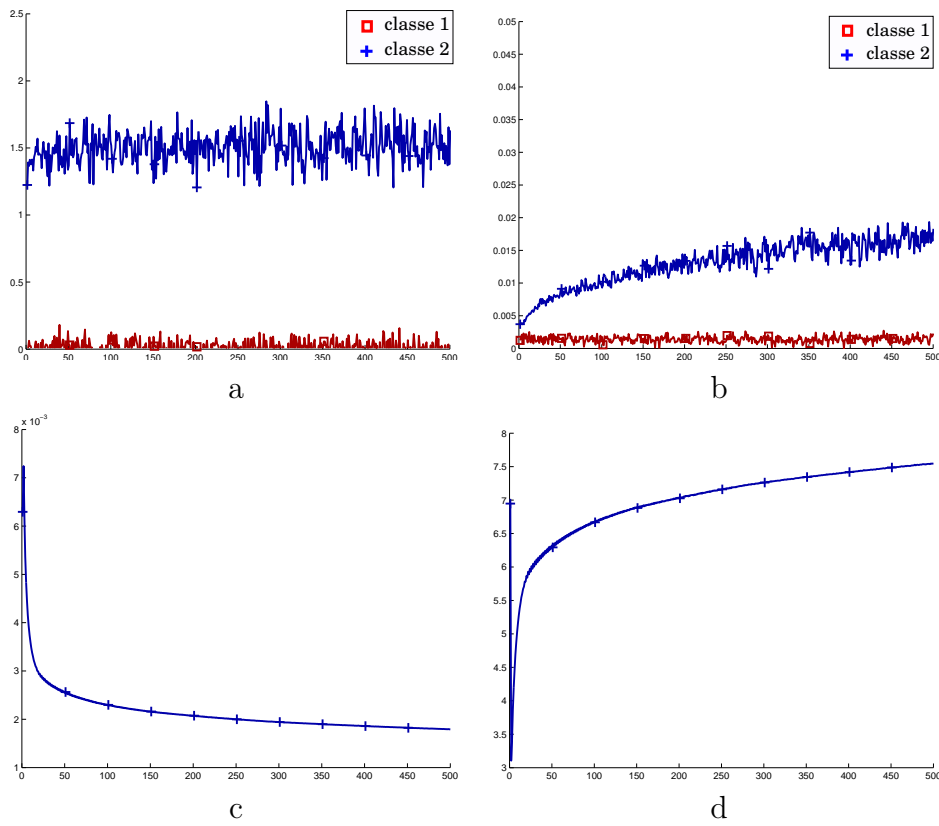


FIGURE 6.23 – L'évolution des hyper-paramètres de l'algorithme *gbLMGI* pour l'objet *2sphère* : a) les moyennes des classes $\tilde{\eta}_\kappa$, b) les variances des classes ρ_κ , c) la variance du bruit d'observation ρ_ϵ , d) la variance du bruit de couplage ρ_ξ .

TABLE 6.7 – Un tableau récapitulatif des erreurs de reconstructions \mathcal{L}_1 pour les différents algorithmes : les colonnes correspondent aux méthodes et les lignes aux objets.

	<i>Moindres carrés</i>	<i>gbLMGI</i>	<i>vbLMGI</i>
<i>2carrés</i>	−40	20.1	20
<i>3disques</i>	−45	19.2	19.25
	<i>Contraste-source modifiée</i>	<i>gbCSMGI</i>	<i>vbCSMGI</i>
<i>2pistes</i>	9	16.3	16.24
<i>3pistes</i>	−1.9	3.1	3.4
	<i>Contraste-source</i>	<i>gbCSMGI</i>	
<i>1sphère</i>	4.1	16.3	
<i>2sphères</i>	3.4	16.1	

6.4.2 Temps de calcul

Le deuxième élément de comparaison des résultats obtenus est le temps de calcul nécessaire pour la reconstruction. Nous nous intéressons plus particulièrement à la comparaison entre l'approche bayésienne variationnelle et l'échantillonneur de Gibbs. Nous

avons utilisé pour notre test une machine de calcul avec un processeur Intel® Xeon® de modèle *X5550* avec une fréquence d'horloge de $2.67GHz$.

Nous montrons, dans la table 6.8, le temps de calcul nécessaire pour chaque algorithme de reconstruction. Toutes les algorithmes étaient codés avec Matlab® sans prise en compte de parallélisme.

TABLE 6.8 – Un tableau récapitulatif des temps de calcul pour les différents algorithmes : Les colonnes correspondent aux méthodes et les lignes aux objets.

	<i>Moindres carrés</i>	<i>vbLMGI</i>	<i>gbLMGI</i>
<i>2carrés</i>	97.5ms	2.4s	42
<i>3disques</i>	97.5ms	1.6s	28
	<i>Contraste-source modifiée</i>	<i>vbCSMGI</i>	<i>gbCSMGI</i>
<i>2pistes</i>	41.25s	54s	2800s
<i>3pistes</i>	96.25s	216s	3h06min
	<i>Contraste-source</i>	<i>gbCSMGI</i>	
<i>1sphère</i>	210s	1h30min	
<i>2sphères</i>	280s	1h30min	

D'une manière générale, les algorithmes fondés sur l'approche bayésienne variationnelle prennent moins de temps que les méthodes basées sur l'échantillonneur de Gibbs. Ceci est dû principalement à la vitesse de convergence de l'approche variationnelle. En effet, l'échantillonnage de Gibbs nécessite plus d'itérations pour produire des échantillons indépendants. De plus, le temps nécessaire pour chaque itération de l'approche variationnelle est moins important que le temps nécessaire pour obtenir un échantillon grâce à la nature paramétrique de l'approche. En comparaison avec les méthodes conventionnelles, l'approche variationnelle nécessite un temps acceptable.

6.4.3 Nombre de classes

Dans notre approche de modélisation *a priori* de l'objet, nous supposons que le nombre de classes K est connu. Dans certaines applications, cette information n'est pas toujours disponible ce qui peut limiter notre approche. Une première approche pour résoudre le problème consiste à faire le choix du modèle. L'idée est de comparer la valeur de l'évidence $p(\mathbf{y}|\mathcal{M})$ pour plusieurs nombres de classes. Ensuite, on choisit le nombre de classes qui maximise l'évidence.

Un des avantages de l'approche bayésienne variationnelle est qu'il fournit une estimation de l'évidence grâce à la valeur de l'énergie libre à la convergence. Nous avons testé ce principe pour l'objet *3disques* : l'algorithme a été lancé pour trois nombres de classes $K = 1, 2$ et 8 . L'évolution de l'énergie libre est décrite sur la figure 6.24. Pour la méthode de reconstruction à 2 classes ou à 8 classes, on trouve la même valeur finale. Cependant, la valeur de l'énergie libre dans le cas d'une classe unique est inférieure.

Néanmoins dans la courbe de l'énergie libre à 8 classes, on trouve des sauts, contrai-

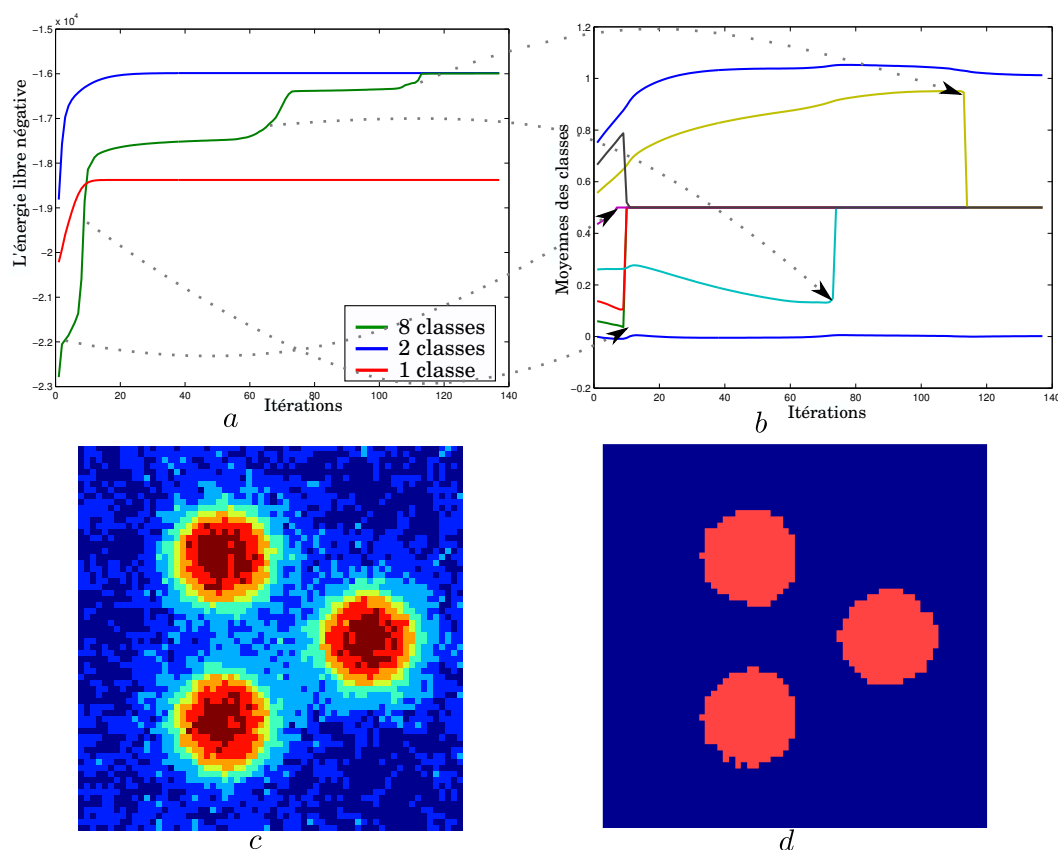


FIGURE 6.24 – L'évolution de l'énergie libre négative de l'algorithme de reconstruction de *vbLMGI* pour plusieurs nombres de classes ; les sauts de valeur de l'énergie correspondent à la fusion de plusieurs classes : a) l'énergie libre négative pour $K = 1, 2$ et 8, b) l'évolution des moyennes des classes dans le cas $K = 8$, c) la segmentation initiale, d) la segmentation finale.

rement au cas de deux classes où l'évolution est continue. En effet, la segmentation finale (la valeur estimée du champ caché) de l'algorithme à 8 classes, est composée de deux classes seulement, pourtant la segmentation initiale contenait huit classes. En regardant l'évolution des classes au cours des itérations, on remarque la fusion des classes caractérisée par des sauts dans les courbes des moyennes vers la valeur de l'*a priori* ($\eta_0 = 0.5$). De plus, les sauts dans la valeur de l'énergie libre correspondent aux moments où les classes fusionnent (fig. 6.24). Le nombre de classes $K = 2$ correspond alors à la valeur maximale de l'énergie libre négative et il est le nombre de classes optimal.

D'une manière générale, les algorithmes fondés sur l'approche bayésienne variationnelle (*vbLMGI* et *vbCSMGI*) convergent vers le nombre de classes optimal s'ils sont initialisés avec un nombre plus important. Nous montrons, sur la figure 6.25, l'évolution des moyennes et de la segmentation pour la reconstruction de l'objet *3pistes*. Nous avons initialisé l'algorithme avec 6 classes. À la convergence, le champ caché final contient deux classes seulement.

Cette propriété permet de fournir un algorithme de reconstruction où la connaissance du nombre de classes n'est pas nécessaire. Il suffit de lancer l'algorithme avec le nombre maximal de classes et ce dernier convergera vers le nombre optimal. Néanmoins, on ne

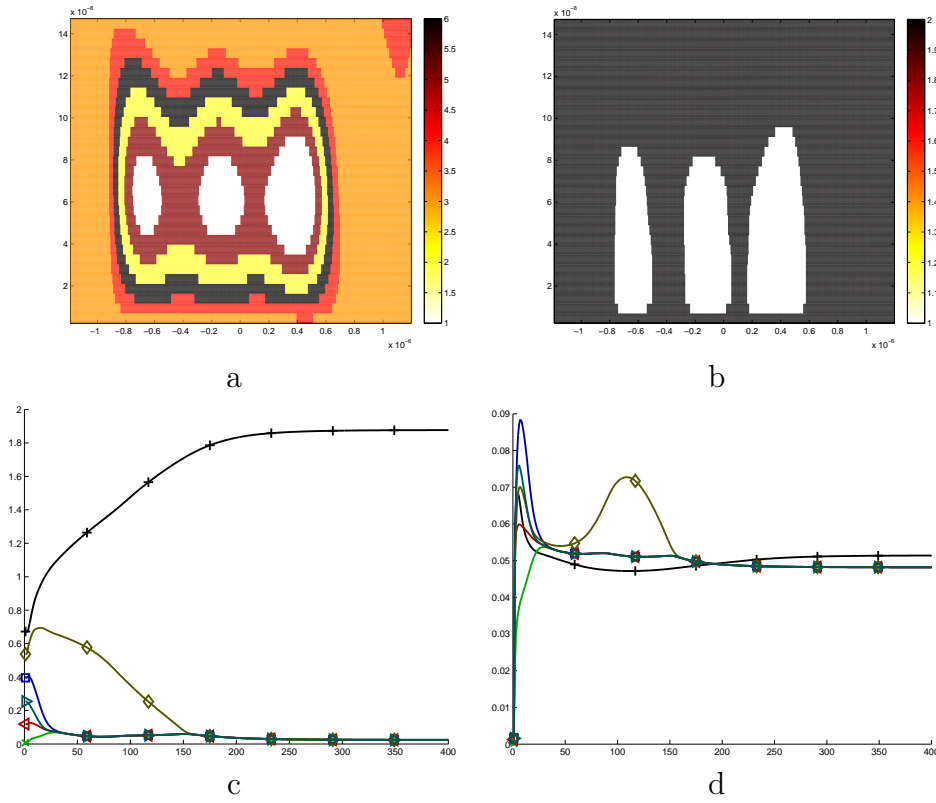


FIGURE 6.25 – L'évolution de la segmentation et les hyper-paramètres pour la reconstruction de l'objet *3pistes* avec $K = 6$: a) la segmentation initiale, b) la segmentation finale, c) les moyennes $\tilde{\eta}_\kappa$, d) les variances $\overline{\rho}_\kappa$

dispose pas de preuves théoriques de cette propriété ; ceci constitue une des perspectives de cette étude. L'inconvénient de cette approche est que le temps de calcul dépend du nombre de classes recherchées.

6.5 Résumé

Dans ce chapitre, nous avons testé les méthodes proposées dans cette thèse. Pour cela, nous avons utilisé des données simulées et expérimentales correspondant à trois applications : la tomographie X, la tomographie optique de diffraction et l'imagerie micro-onde 3D. Les méthodes proposées ont montré de meilleures qualités de reconstruction que les méthodes conventionnelles. Cependant, l'approche bayésienne variationnelle permet de gagner en ordre de grandeur en temps de calcul par rapport à la méthode MCMC.

Nous concluons, dans le chapitre suivant, ce travail en faisant le point sur les éléments qui nécessitent des études plus approfondies et nous donnerons quelques perceptions.

Conclusions et perspectives

7.1 Bilan

Nous avons présenté, dans ce manuscrit, le problème d'imagerie de diffraction. Ce mode d'imagerie est un problème inverse mal posé qui nécessite l'introduction d'informations *a priori* afin de régulariser la solution. En plus d'être mal posé, ce problème est également non linéaire avec une complexité de calcul très importante.

La modélisation directe est fondée sur une représentation intégrale du champ électrique, la méthode des moments étant utilisée pour l'obtention du modèle discret. La validation des modèles directs proposés dans le cadre de cette étude est effectuée par comparaison aux résultats théoriques et, quand cela est possible, aux données expérimentales. Ces modèles donnent de bonnes performances.

Nous avons proposé une approche bayésienne pour le problème inverse avec un modèle *a priori* de Gauss-Markov-Potts qui prend en compte les informations disponibles sur l'objet recherché. Nous avons considéré, dans cette étude, des objets composés d'un nombre fini et connu de matériaux homogènes distribués en régions compactes.

Les objets étudiés ici ont un contraste important, ce qui empêche l'application de l'approximation de Born pour linéariser le modèle direct. Pour cela, nous avons adopté une approche bilinéaire où on choisit d'estimer conjointement les courants \mathbf{w} , le contraste \mathbf{x} et tous les autres paramètres introduits par le modèle.

Comme l'estimateur conjoint n'a pas une forme explicite, nous approchons la loi *a posteriori* jointe en utilisant deux méthodes : l'échantillonnage de Gibbs et l'approche bayésienne variationnelle. Les méthodes proposées ont été testées pour trois applications : la tomographie X, la tomographie optique de diffraction et l'imagerie micro-onde. Elles ont donné de bons résultats de reconstruction comparées avec les méthodes de reconstruction conventionnelles.

La première méthode d'approximation de la loi *a posteriori* fondée sur l'échantillonnage de Gibbs donne de bons résultats de reconstruction avec une exploration de la loi *a posteriori*. La difficulté principale liée à cette approche est le temps de calcul nécessaire pour obtenir l'estimation. De plus, elle nécessite d'avoir des lois conjuguées pour pouvoir échantillonner les lois conditionnelles facilement. Cette contrainte peut être contournée en utilisant d'autres méthodes d'échantillonnage, comme l'algorithme de Metropolis-Hasting, ce qui peut augmenter le temps nécessaire pour le calcul de l'estimation.

De son côté, l'approche bayésienne variationnelle permet d'avoir une approximation analytique de la loi *a posteriori*. Ceci transforme le calcul de l'estimateur en un problème de calcul paramétrique itératif, ce qui réduit le temps de calcul d'une manière importante par rapport aux méthodes fondées sur l'échantillonnage. En outre, l'approche bayésienne variationnelle permet d'obtenir une estimation de l'évidence du modèle via l'énergie libre négative sans coût de calcul important. Ceci est intéressant pour répondre au problème de sélection de modèles (comme par exemple, le choix du nombre de classes).

La difficulté principale liée à cette approche est la nécessité d'avoir des formes conjuguées des lois pour pouvoir exploiter les lois approchantes. Pour contourner ce problème, une approche sous-optimale consiste à chercher une loi approchante avec une forme paramétrique fixée minimisant la divergence de Kullback-Leibler. Cependant, cette approche est considérée comme une approche locale qui risque de se bloquer dans des maxima locaux.

7.2 Perspectives

Dans cette thèse, nous avons répondu à un certain nombre de questions concernant le problème inverse en imagerie de diffraction. Néanmoins, il reste encore des points importants à traiter du point de vue théorique et du point de vue pratique. Nous présentons dans cette partie quelques points de recherches futures concernant à la fois les aspects théoriques de l'inversion et les aspects de mise en œuvre.

7.2.1 Calcul bayésien

Nous avons étudié deux approches pour l'approximation de la loi *a posteriori* : l'échantillonnage de Gibbs et l'approche bayésienne variationnelle. Ces deux approches ont été appliquées d'une manière séparée. Une des perspectives de cette étude réside dans les approches hybrides où l'on utilise l'approche bayésienne variationnelle pour séparer les variables à faibles dépendances et l'échantillonnage pour approximer les parties à fortes dépendances ou les parties pour lesquelles on ne dispose pas d'une loi conjuguée. Ceci représente un compromis entre la rapidité de calcul due à la séparation dans l'approche variationnelle et l'exploration de la loi *a posteriori* introduite par l'échantillonnage.

En ce qui concerne l'approche bayésienne variationnelle, nous notons les points suivants :

1. l'étude de l'évolution du nombre de classes "actives" au cours de la reconstruction.

Les premières observations montrent que ce nombre tend vers le nombre de classes réel de l'objet si l'algorithme est initialisé avec un nombre plus important. Cette propriété est importante pour éviter l'estimation directe du nombre de classes et sa complexité. Néanmoins, il faut étudier les conditions nécessaires pour avoir ce comportement,

2. le choix de séparation joue un rôle important dans la qualité de reconstruction. En effet, il permet d'avoir un compromis entre la qualité de reconstruction et le temps de calcul,
3. l'intégration de l'estimation du paramètre de corrélation du champ de Potts dans le processus d'estimation conjointe de la loi *a posteriori*.

7.2.2 Modèle *a priori*

Nous donnons, par la suite, les améliorations envisageables pour le modèle *a priori* :

1. la prise en compte de poids *a priori* différents pour les différentes classes. Cette modélisation permet de prendre en compte des objets pour lesquels la répartition de matériaux est connue *a priori*. Ceci peut être réalisé avec le modèle de Potts avec champ externe,
2. dans notre approche, nous traitons les informations issues de différentes fréquences d'excitation d'une manière uniforme pour la reconstruction du contraste. Nous pouvons mettre des *a priori* différents en fonction de la fréquence et favoriser les hautes fréquences pour préserver les contours et les basses fréquences pour sonder les zones profondes.

7.2.3 Mises en œuvre

Comme nous l'avons montré précédemment, le problème de reconstruction a un coût de calcul très important qui croît rapidement avec la dimension du problème. Ceci rend l'application de ces solutions irréalisable pour des dimensions réalistes. La solution pour diminuer le temps de calcul consiste à programmer ces algorithmes d'une manière parallèle pour les exécuter sur des clusters de calcul scientifique. Nous avons déjà commencé la parallélisation du problème direct.

Récemment, une nouvelle technique de calcul parallèle est apparue. Elle est basée sur l'utilisation des processeurs des cartes graphiques (GPU). Ces processeurs fournissent un nombre très important de noeuds de calcul qui permet une accélération importante des algorithmes pouvant être hautement parallélisés. Un projet est déjà lancé au sein de l'équipe pour l'accélération des méthodes de reconstruction en tomographie X [GMDH08].

7.2.4 Choix de traitement de la non linéarité

Nous avons présenté dans le premier chapitre les différentes approches pour traiter la non linéarité du problème direct (fig. 1.13). L'intérêt de l'approche bilinéaire que nous avons adoptée ici est de remplacer l'inversion d'un modèle non linéaire par deux

équations linéaires avec une inconnue en plus. Néanmoins, l'estimation de cette variable peut dégrader la qualité de reconstruction. Si on écrit le modèle direct dans sa forme non linéaire, on trouve :

$$\mathbf{y} = \mathbf{G}^o (I - \mathbf{X}\mathbf{G}^c)^{-1} \mathbf{X}\mathbf{E}^o + \epsilon^\dagger. \quad (7.1)$$

En gardant une modélisation gaussienne pour le bruit ϵ^\dagger , la vraisemblance du modèle devient :

$$p(\mathbf{y}|\mathbf{x}, \rho_{\epsilon^\dagger}) = \frac{1}{(2\pi\rho_{\epsilon^\dagger})^{\frac{M}{2}}} \exp \left(-\frac{\|\mathbf{y} - \mathbf{G}^o [I - \mathbf{X}\mathbf{G}^c]^{-1} \mathbf{X}\mathbf{E}^o\|_2^2}{2\rho_{\epsilon^\dagger}} \right). \quad (7.2)$$

Bien qu'il soit difficile de trouver une loi *a priori* conjuguée pour \mathbf{x} à cause de la dépendance non linéaire de la vraisemblance, il est possible d'établir un estimateur sous-optimal de la loi *a posteriori* par l'approche bayésienne variationnelle avec une loi approchante à forme contrainte. Il est intéressant de comparer la performance d'une telle approche à celles des méthodes classiques fondées sur la méthode de Newton.

7.2.5 Modèle direct

Le modèle discret proposé dans cette thèse est fondé sur l'application de la méthode des moments aux équations intégrales en champ électrique. Comme fonctions de base, nous avons utilisé des fonctions rectangulaires. Ce choix permet de faciliter l'expression du modèle direct et de conserver la nature convolutionnelle des équations. Néanmoins, dans des configurations 2D-TE ou 3D, la continuité de la densité de flux électrique sur les contours des pixels n'est pas garantie. Nous envisageons d'autres type de fonctions de base qui imposent cette continuité.



Définitions des lois de probabilité

A.1 Gaussien

Soit x une variable aléatoire qui suit une loi gaussienne $\mathcal{N}(m, v)$. On définit la densité de probabilité de cette variable comme :

$$p(x|m, v) = \frac{1}{\sqrt{2\pi v}} \exp\left(-\frac{|x - m|^2}{2v}\right), \quad \forall x \in \mathbb{R}, \quad (\text{A.1})$$

où m est sa moyenne et v sa variance. On rappelle les moments d'ordre 1 et 2 :

$$\langle x \rangle_{p(x)} = m, \quad (\text{A.2})$$

$$\langle x^2 \rangle_{p(x)} = m^2 + v \quad (\text{A.3})$$

et l'entropie :

$$\mathcal{H}(p) = \frac{1}{2} \log(2\pi e v). \quad (\text{A.4})$$

De la même manière, on définit la densité de probabilité d'un vecteur aléatoire \mathbf{x} de taille N suivant une loi gaussienne multivariée $\mathcal{N}(\mathbf{m}, \mathbf{V})$ comme :

$$p(\mathbf{x}|\mathbf{m}, \mathbf{V}) = \frac{1}{(2\pi)^{\frac{N}{2}} |\mathbf{V}|^{\frac{1}{2}}} \exp\left(-\frac{1}{2}(\mathbf{x} - \mathbf{m})^T \mathbf{V}^{-1}(\mathbf{x} - \mathbf{m})\right), \quad (\text{A.5})$$

où \mathbf{m} est le vecteur des moyennes et \mathbf{V} la matrice de covariance. Les moments de premier et deuxième ordres sont :

$$\langle \mathbf{x} \rangle_{p(\mathbf{x})} = \mathbf{m}, \quad (\text{A.6})$$

$$\langle \mathbf{x} \mathbf{x}^T \rangle_{p(\mathbf{x})} = \mathbf{m} \mathbf{m}^T + \mathbf{V} \quad (\text{A.7})$$

et l'entropie :

$$\mathcal{H}(p) = \frac{N}{2} \log(2\pi e) + \log(|\mathbf{V}|^{1/2}). \quad (\text{A.8})$$

A.2 Gamma et inverse gamma

Soit ρ une variable aléatoire qui suit une loi gamma $\mathcal{G}(\gamma, \phi)$. On définit la densité de probabilité de cette variable comme :

$$p(\rho|\gamma, \phi) = \frac{\gamma^{-\phi} \rho^{\phi-1}}{\Gamma(\phi)} \exp\left(-\frac{\rho}{\gamma}\right), \quad \forall \rho \in \mathbb{R}^+, \quad (\text{A.9})$$

où $\Gamma(\cdot)$ est la fonction gamma. On rappelle les moments de premier ordre et logarithmique :

$$\langle \rho \rangle_{p(\rho)} = \gamma\phi, \quad (\text{A.10})$$

$$\langle \log(\rho) \rangle_{p(\rho)} = \Psi(\gamma) + \log(\phi), \quad (\text{A.11})$$

avec $\Psi(\cdot)$ la fonction digamma. L'entropie est définie comme :

$$\mathcal{H}(p) = \phi + \log(\gamma\Gamma(\phi)) + (1 + \phi)\Psi(\phi). \quad (\text{A.12})$$

De la même manière, on définit la densité de probabilité d'une variable selon une loi inverse-gamma $\mathcal{IG}(\gamma, \phi)$ comme :

$$p(\rho|\gamma, \phi) = \frac{\gamma^{\phi-1} \rho^{-\phi-1}}{\Gamma(\phi)} \exp\left(-\frac{\gamma}{\rho}\right), \quad \forall \rho \in \mathbb{R}^+ \quad (\text{A.13})$$

et les moments de premier ordre, inverse et logarithmique :

$$\langle \rho \rangle_{p(\rho)} = \frac{\gamma}{\phi - 1}, \quad \forall \phi > 1 \quad (\text{A.14})$$

$$\langle \rho^{-1} \rangle_{p(\rho)} = \frac{\phi}{\gamma}, \quad (\text{A.15})$$

$$\langle \log(\rho) \rangle_{p(\rho)} = \Psi(\gamma) - \log(\phi) \quad (\text{A.16})$$

et l'entropie :

$$\mathcal{H}(p) = \phi + \log(\gamma\Gamma(\phi)) - (1 + \phi)\Psi(\phi). \quad (\text{A.17})$$

B

Estimation du paramètre de Potts

B.1 Introduction

Le modèle de Potts est un modèle markovien discret qui définit la probabilité pour une variable $z(\mathbf{r})$ de prendre une valeur $\kappa(\mathbf{r})$ en fonction du nombre de ses voisins prenant la même valeur de la manière suivante :

$$p(\mathbf{z} = \boldsymbol{\kappa} | \Upsilon) = \exp(\Upsilon \varphi(\boldsymbol{\kappa}) - \Xi_{\Upsilon}) \quad (\text{B.1})$$

$$= \exp\left(\Upsilon \sum_{\mathbf{r}} \sum_{\mathbf{r}' \in \mathcal{V}(\mathbf{r})} \delta(\kappa(\mathbf{r}) - \kappa(\mathbf{r}')) - \Xi_{\Upsilon}\right), \quad (\text{B.2})$$

où $\exp(\Xi_{\Upsilon}) = \sum_{\boldsymbol{\kappa}} \exp\left(\Upsilon \sum_{\mathbf{r}} \sum_{\mathbf{r}' \in \mathcal{V}(\mathbf{r})} \delta(\kappa(\mathbf{r}) - \kappa(\mathbf{r}'))\right)$ est la fonction de partition du champ de Potts et Υ est le paramètre de corrélation entre les voisins. Comme on a vu dans 3.3.2, le choix de la valeur de ce paramètre joue un rôle important dans la définition de la taille des zones homogènes.

Le problème de l'estimation de ce paramètre est la dépendance non explicite de la fonction de partition de Υ . Même l'évaluation numérique de cette fonction n'est pas faisable à cause de la grande dimension et du nombre de combinaisons possibles dans la somme. Pour cela, on propose une méthode d'estimation de ce paramètre fondée sur l'approche bayésienne variationnelle.

L'idée est d'approcher la loi du champ de Potts p par une loi séparable q , et ensuite d'utiliser cette loi approchante pour calculer la valeur optimale de Υ . Le calcul de la valeur optimale doit être plus facile avec la loi séparable car la fonction de partition est plus facile à obtenir.

B.2 Approximation séparable

Considérons le cas d'un champ de Potts avec K états. Le paramètre Υ qui maximise la probabilité d'une configuration donnée κ s'écrit sous la forme :

$$\Upsilon_{mv} = \arg \max_{\Upsilon \in \mathbb{R}^+} p(\mathbf{z} = \kappa | \Upsilon) \quad (\text{B.3})$$

$$= \arg \max_{\Upsilon \in \mathbb{R}^+} \log(p(\mathbf{z} = \kappa | \Upsilon)) \quad (\text{B.4})$$

$$= \arg \max_{\Upsilon \in \mathbb{R}^+} \Upsilon \varphi(\kappa) - \Xi_{\Upsilon}. \quad (\text{B.5})$$

En dérivant par rapport à Υ , on trouve que la valeur de Υ optimale satisfait :

$$\dot{\Xi}_{\Upsilon} = \varphi(\kappa) \quad (\text{B.6})$$

La difficulté vient de l'absence d'une expression explicite de la fonction de partition (sauf pour le cas $K = 2$) ainsi que de sa dérivée. L'évaluation numérique n'est pas possible à cause de la grande dimension de l'espace. L'idée de notre approche est d'approximer la loi p par une autre loi séparable $q(\mathbf{z}) = \prod_{\mathbf{r}} q(z(\mathbf{r}))$ qui minimise la divergence de Kullback-Liebler :

$$q = \arg \min KL(q || p). \quad (\text{B.7})$$

En prenant une séparation forte entre les variables, on trouve la solution de ce problème d'optimisation fonctionnelle comme suit :

$$q(z(\mathbf{r}) = \kappa) = \exp \left(\Upsilon \sum_{\mathbf{r}' \in \mathcal{V}(\mathbf{r})} \tilde{\zeta}_{\kappa}(\mathbf{r}') - \Xi_{q, \Upsilon}(\mathbf{r}) \right), \quad (\text{B.8})$$

où $\tilde{\zeta}_{\kappa}(\mathbf{r}) = q(z(\mathbf{r}) = \kappa)$ et $\Xi_{q, \Upsilon}(\mathbf{r})$ est la fonction de partition de $q(z(\mathbf{r}))$:

$$\Xi_{q, \Upsilon}(\mathbf{r}) = \log \left(\sum_{\kappa=1}^K \exp \left(\Upsilon \sum_{\mathbf{r}' \in \mathcal{V}(\mathbf{r})} \zeta_{\kappa}(\mathbf{r}') \right) \right). \quad (\text{B.9})$$

On cherche la valeur de Υ qui maximise la vraisemblance d'une configuration κ pour la loi approchante q . Sous l'hypothèse que q est suffisamment proche de p , cette valeur peut être utilisée comme la valeur optimale pour p . En utilisant le même développement que celui présenté précédemment, on trouve :

$$\sum_{\mathbf{r}'} \dot{\Xi}_{q, \Upsilon}(\mathbf{r}') = \sum_{\mathbf{r}} \sum_{\mathbf{r}' \in \mathcal{V}(\mathbf{r})} \tilde{\zeta}_{\kappa}(\mathbf{r}'). \quad (\text{B.10})$$

Bien que l'on ne dispose pas d'une expression explicite de la fonction de partition $\Xi_{q, \Upsilon}$, son évaluation numérique est nettement plus facile grâce au choix de la séparation. On peut voir cette approche comme une approximation de la fonction de partition $\exp(\Xi_{\Upsilon})$ par la fonction de partition de la loi approchante $\exp(\sum_{\mathbf{r}} \Xi_{q, \Upsilon}(\mathbf{r}))$.

B.3 Résultat

Pour tester la qualité de l'approximation de cette méthode, nous avons étudié la dérivée de la fonction de partition de la loi approchante $\Xi_{q,\gamma}$. Pour la comparaison, nous utilisons la fonction analytique Ξ_γ pour le champ d'Ising $K = 2$. Ainsi, nous utilisons une estimation de l'énergie moyenne $\varphi(\kappa)$ par des échantillons du champ de Potts. Nous présentons la comparaison entre les trois grandeurs sur la figure B.1 pour le champ d'Ising. On remarque que la qualité de l'approximation est acceptable spécialement pour les valeurs au dessous de la valeur critique. La différence entre les deux courbes pour les valeurs supérieures peut être attribuée à une erreur dans l'échantillonneur qui ne fournit pas l'énergie souhaitée. De plus, l'expression analytique de la fonction de partition est obtenue sous l'hypothèse que la dimension du champ tend vers l'infini. Néanmoins, l'estimation de la fonction de partition par l'approche variationnelle suit bien l'évolution de l'énergie.

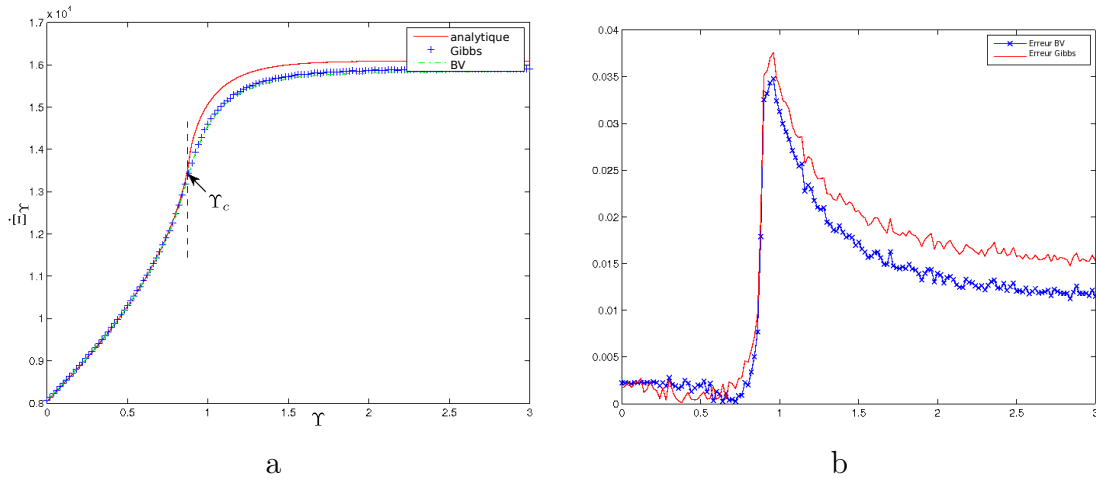


FIGURE B.1 – La comparaison entre les dérivées de la fonction de partition dans le cas du champ d'Ising $K = 2$: a) les fonctions Ξ_γ , $\Xi_{q,\gamma}$ et l'estimation de l'énergie φ par l'échantillonnage de Gibbs, b) l'erreur relative entre la fonction analytique et l'estimation par l'approche variationnelle d'un côté et de l'énergie obtenue par l'échantillonnage de Gibbs de l'autre côté

La deuxième étape de test, consiste à comparer la fonction de partition de la loi approchante et l'énergie calculée par l'échantillonnage de Gibbs (fig. B.2). On note que la fonction de partition de la loi approchante suit bien l'énergie obtenue par l'échantillonnage.

L'intérêt de l'approche bayésienne variationnelle est le temps de calcul réduit dû au fait que la fonction de partition se calcule par une somme monodimensionnelle. La figure B.3 présente le temps de calcul pour la méthode proposée et l'échantillonnage de Gibbs pour différentes tailles de champ et pour différents nombres de classes.

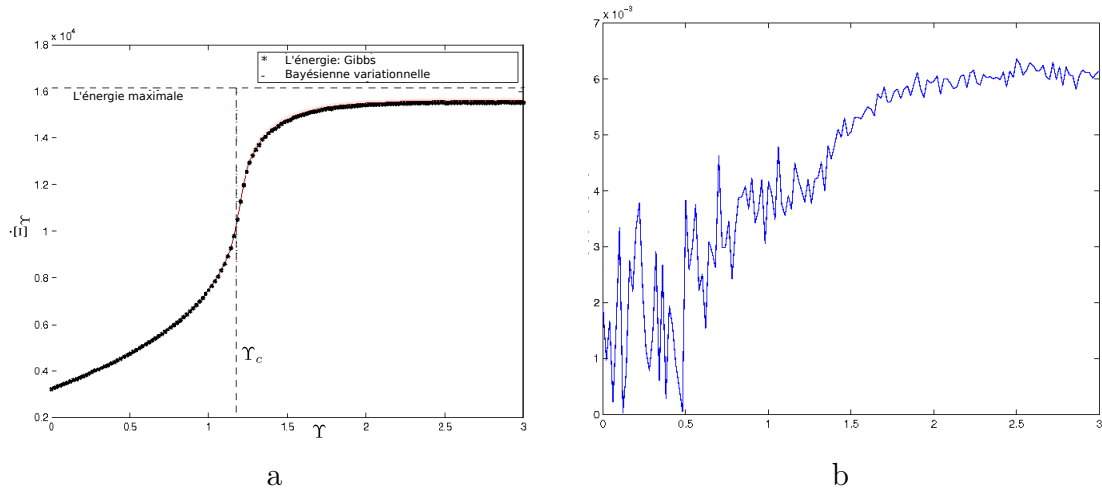


FIGURE B.2 – La comparaison entre les dérivées de la fonction de partition dans le cas du champ de Potts $K = 5$: a) la fonction $\Xi_{q,\gamma}$ et l'estimation de l'énergie φ par l'échantillonnage de Gibbs, b) l'erreur relative entre deux estimations.

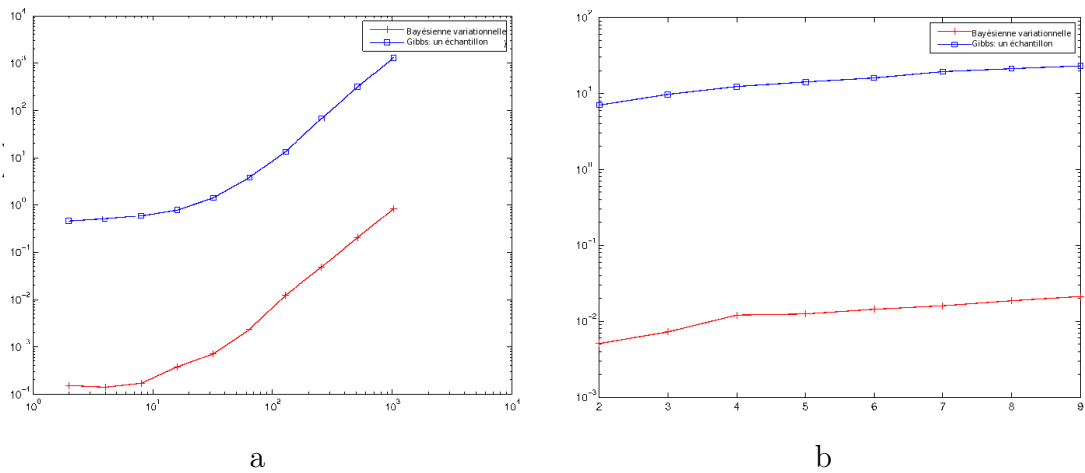


FIGURE B.3 – Le temps de calcul pour l'approche variationnelle et pour l'échantillonnage de Gibbs : a) le temps de calcul en secondes en fonction de la taille du champ, b) le temps de calcul en secondes en fonction du nombre de classes



Détails de calcul de vbLMGI et vbLMGM

C.1 Contraste

La loi approchante pour le contraste $q(x(\mathbf{r}))$ s'écrit sous la forme :

$$\begin{aligned}
 \log(q(x(\mathbf{r}))|z(\mathbf{r})) &\propto \langle \log(p(\mathbf{x}, \mathbf{z}, \boldsymbol{\psi}, \mathbf{y})) \rangle_{\prod_{\mathbf{r}' \neq \mathbf{r}} q(x(\mathbf{r}')|z(\mathbf{r}')) q(z(\mathbf{r}')) q(\boldsymbol{\psi})} \\
 &\propto \langle \log(p(\mathbf{y}|\mathbf{x}, \rho_\epsilon)) + \log(p(\mathbf{x}|\mathbf{z}, \boldsymbol{\rho}, \boldsymbol{\eta})) \rangle_{\prod_{\mathbf{r}' \neq \mathbf{r}} q(x(\mathbf{r}')) q(\mathbf{z}) q(\boldsymbol{\psi})} \\
 &\propto -\frac{\overline{\rho_\epsilon^{-1}}}{2} \langle \|\mathbf{y} - \mathbf{H}\mathbf{x}\|_2^2 \rangle_{q(/x(\mathbf{r}))} - \frac{1}{2} \langle (\mathbf{x} - \mathbf{m}_x)^t \mathbf{V}_x^{-1} (\mathbf{x} - \mathbf{m}_x) \rangle_{q(/x(\mathbf{r}))}, \quad (\text{C.1})
 \end{aligned}$$

avec $q(/x(\mathbf{r})) = \prod_{\mathbf{r}' \neq \mathbf{r}} q(x(\mathbf{r}'), z(\mathbf{r}')) q(\boldsymbol{\psi})$,

$$\begin{aligned}
 \langle \|\mathbf{y} - \mathbf{H}\mathbf{x}\|_2^2 \rangle_{q(/x(\mathbf{r}))} &= \|\mathbf{y}\|_2^2 - 2 \langle \mathbf{y}^t \mathbf{H}\mathbf{x} \rangle_{q(/x(\mathbf{r}))} + \langle \mathbf{x}^t \mathbf{H}^t \mathbf{H}\mathbf{x} \rangle_{q(/x(\mathbf{r}))} \\
 &= \|\mathbf{y}\|_2^2 - 2 \sum_{\mathbf{r}'} y(\mathbf{r}') \sum_{\mathbf{r}'' \neq \mathbf{r}} h(\mathbf{r}', \mathbf{r}'') \bar{x}(\mathbf{r}'') - 2 \sum_{\mathbf{r}'} y(\mathbf{r}') h(\mathbf{r}', \mathbf{r}) x(\mathbf{r}) \\
 &\quad + \left\langle \sum_{\mathbf{r}'''} \sum_{\mathbf{r}' \neq \mathbf{r}} \sum_{\mathbf{r}'' \neq \mathbf{r}} x(\mathbf{r}') h(\mathbf{r}''', \mathbf{r}') h(\mathbf{r}''', \mathbf{r}'') x(\mathbf{r}'') \right\rangle_{q(/x(\mathbf{r}))} \\
 &\quad + 2 \sum_{\mathbf{r}'''} h(\mathbf{r}''', \mathbf{r}) \left(\sum_{\mathbf{r}' \neq \mathbf{r}} \bar{x}(\mathbf{r}') h(\mathbf{r}''', \mathbf{r}') \right) h(\mathbf{r}''', \mathbf{r}) x(\mathbf{r}) \\
 &\quad + \sum_{\mathbf{r}'''} h^2(\mathbf{r}''', \mathbf{r}) x^2(\mathbf{r}). \\
 &= \sum_{\mathbf{r}'''} h^2(\mathbf{r}''', \mathbf{r}) x^2(\mathbf{r}) + 2 \sum_{\mathbf{r}''} h(\mathbf{r}'', \mathbf{r}) \left(y(\mathbf{r}'') - \sum_{\mathbf{r}' \neq \mathbf{r}} h(\mathbf{r}'', \mathbf{r}') \tilde{m}_{x, \kappa}(\mathbf{r}') \right) x(\mathbf{r}) \\
 &\quad + cte \quad (\text{C.2})
 \end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
 \left\langle (\mathbf{x} - \mathbf{m}_x)^t \mathbf{V}_x^{-1} (\mathbf{x} - \mathbf{m}_x) \right\rangle_{q(/x(\mathbf{r}))} &= \sum_{\mathbf{r}'} \left\langle \mathcal{C}_\kappa(\mathbf{r}) \frac{\|x(\mathbf{r}') - \eta_\kappa\|_2^2}{\rho_\kappa} \right\rangle_{q(/x(\mathbf{r}))} \\
 &+ \left\langle \sum_{\mathbf{r}'} (1 - \mathcal{C}_\kappa(\mathbf{r})) \frac{\sum_{\mathbf{r}''} \|x(\mathbf{r}') - x(\mathbf{r}'')\|_2^2}{2N_\mathcal{V}\rho_\kappa} \right\rangle_{q(/x(\mathbf{r}))} \\
 &= \overline{\rho_\kappa^{-1}} \left(x^2(\mathbf{r}) - 2 \left(\tilde{\mathcal{C}}_\kappa(\mathbf{r}) \tilde{\eta}_\kappa + \frac{1 - \tilde{\mathcal{C}}_\kappa(\mathbf{r})}{N_\mathcal{V}} \sum_{\mathbf{r}'' \in \mathcal{V}(\mathbf{r})} \bar{x}(\mathbf{r}'') \right) x(\mathbf{r}) \right) + cte,
 \end{aligned} \tag{C.3}$$

avec

$$\tilde{\mathcal{C}}_\kappa(\mathbf{r}) = \begin{cases} 1 & \text{MGI} \\ 1 - \prod_{\mathbf{r}' \in \mathcal{V}(\mathbf{r})} \tilde{\zeta}_\kappa(\mathbf{r}') & \text{MGM} \end{cases}. \tag{C.4}$$

En regroupant les différents termes, on trouve :

$$\begin{aligned}
 \log(q(x(\mathbf{r})|z(\mathbf{r}))) &\propto \left(\overline{\rho_\kappa^{-1}} + \overline{\rho_\epsilon^{-1}} \sum_{\mathbf{r}'''} h^2(\mathbf{r}''', \mathbf{r}) \right) x^2(\mathbf{r}) \\
 &+ 2 \left[\overline{\rho_\kappa^{-1}} \left(\tilde{\mathcal{C}}_\kappa(\mathbf{r}) \tilde{\eta}_\kappa + \frac{1 - \tilde{\mathcal{C}}_\kappa(\mathbf{r})}{N_\mathcal{V}} \sum_{\mathbf{r}'' \in \mathcal{V}(\mathbf{r})} \tilde{m}_{x,\kappa}(\mathbf{r}'') \right) \right. \\
 &\left. + \overline{\rho_\kappa^{-1}} \left(\sum_{\mathbf{r}''} h(\mathbf{r}'', \mathbf{r}) \left(y(\mathbf{r}'') - \sum_{\mathbf{r}' \neq \mathbf{r}} h(\mathbf{r}'', \mathbf{r}') \tilde{m}_{x,\kappa}(\mathbf{r}') \right) \right) \right] x(\mathbf{r}) + cte.
 \end{aligned} \tag{C.5}$$

La loi approchante a une forme quadratique en fonction de $x(\mathbf{r})$. Par identification, on trouve :

$$q(x(\mathbf{r})|z(\mathbf{r}) = \kappa) = \mathcal{N}(\tilde{m}_{x,\kappa}, \tilde{v}_{x,\kappa}(\mathbf{r})), \tag{C.6}$$

où

$$\tilde{v}_{x,\kappa}^n(\mathbf{r}) = \left[\overline{\rho_\epsilon^{-1}} \Gamma_{\mathbf{H}}(\mathbf{r}) + \overline{\rho_\kappa^{-1}} \right]^{-1}, \tag{C.7}$$

$$\begin{aligned}
 \tilde{m}_{x,\kappa}^n(\mathbf{r}) &= (\tilde{v}_x^n(\mathbf{r})) \left[\overline{\rho_\epsilon^{-1}} \left(\frac{1 - \tilde{\mathcal{C}}_\kappa(\mathbf{r})}{N_\mathcal{V}} \sum_{\mathbf{r}'} \tilde{m}_{x,\kappa}(\mathbf{r}') + \tilde{\mathcal{C}}_\kappa(\mathbf{r}) \tilde{\eta}_\kappa \right) \right. \\
 &\left. + \overline{\rho_\epsilon^{-1}} \sum_{\mathbf{r}'} h(\mathbf{r}', \mathbf{r}) \left(y(\mathbf{r}') - \sum_{\mathbf{r}'' \neq \mathbf{r}} h(\mathbf{r}', \mathbf{r}'') \tilde{m}_{x,\kappa}(\mathbf{r}'') \right) \right].
 \end{aligned} \tag{C.8}$$

En complétant le terme manquant ($\tilde{m}_{x,\kappa}$) dans l'équation C.8, on peut écrire :

$$\begin{aligned}
 \tilde{m}_{x,\kappa}^n(\mathbf{r}) &= \tilde{m}_{x,\kappa} + (\tilde{v}_x^n(\mathbf{r})) \left[\overline{\rho_\kappa^{-1}} (\tilde{m}_{x,\kappa}^\dagger(\mathbf{r}) - \tilde{m}_{x,\kappa}) \right. \\
 &\left. + \overline{\rho_\epsilon^{-1}} \sum_{\mathbf{r}'} h(\mathbf{r}', \mathbf{r}) \left(y(\mathbf{r}') - \sum_{\mathbf{r}''} h(\mathbf{r}', \mathbf{r}'') \tilde{m}_{x,\kappa}(\mathbf{r}'') \right) \right],
 \end{aligned} \tag{C.9}$$

avec

$$\tilde{m}_{x,\kappa}^\dagger(\mathbf{r}) = \frac{1 - \tilde{\mathcal{C}}_\kappa(\mathbf{r})}{N_\mathcal{V}} \sum_{\mathbf{r}' \in \mathcal{V}(\mathbf{r})} \tilde{m}_{x,\kappa}(\mathbf{r}') + \tilde{\mathcal{C}}_\kappa(\mathbf{r}) \tilde{\eta}_\kappa. \tag{C.10}$$

Finalement, on écrit la loi approchante $q(\mathbf{x}|\mathbf{z} = \boldsymbol{\kappa})$ sous la forme :

$$q(\mathbf{x}|\mathbf{z} = \boldsymbol{\kappa}) = \mathcal{N}(\tilde{\mathbf{m}}_{x,\boldsymbol{\kappa}}, \tilde{\mathbf{V}}_{x,\boldsymbol{\kappa}}), \quad (\text{C.11})$$

où

$$\tilde{\mathbf{V}}_{x,\boldsymbol{\kappa}}^n = \left[\text{Diag} \left(\overline{\rho_\epsilon^{-1}} \Gamma_{\mathbf{H}} + \overline{\rho_\kappa^{-1}} \right) \right]^{-1} \quad (\text{C.12})$$

$$\tilde{\mathbf{m}}_{x,\boldsymbol{\kappa}}^n = \tilde{\mathbf{m}}_{x,\boldsymbol{\kappa}} + \tilde{\mathbf{V}}_{x,\boldsymbol{\kappa}}^n \left[\overline{\rho_\epsilon^{-1}} (\tilde{\mathbf{m}}_{x,\boldsymbol{\kappa}}^\dagger - \tilde{\mathbf{m}}_{x,\boldsymbol{\kappa}}) + \overline{\rho_\epsilon^{-1}} \mathbf{H}^t (\mathbf{y} - \mathbf{H} \tilde{\mathbf{m}}_{x,\boldsymbol{\kappa}}) \right]. \quad (\text{C.13})$$

C.2 Champ caché

$$\begin{aligned} \log(q(z(\mathbf{r}) = \kappa)) &= \log(\tilde{\zeta}_\kappa(\mathbf{r})) \propto \langle \log(p(\mathbf{y}|\mathbf{x}, \rho_\epsilon) p(\mathbf{x}|\mathbf{z}, \boldsymbol{\eta}, \boldsymbol{\rho}) p(\mathbf{z}|\Upsilon)) \rangle_{q(/z(rb))} \\ &\propto \langle \log(p(\mathbf{y}|\mathbf{x}, \rho_\epsilon) p(\mathbf{x}|\mathbf{z}, \boldsymbol{\eta}, \boldsymbol{\rho})) \rangle_{q(/z(rb))} + \langle \log(p(\mathbf{z}|\Upsilon)) \rangle_{q(/z(rb))}, \end{aligned} \quad (\text{C.14})$$

avec $q(/z(rb)) = \prod_{\mathbf{r}' \neq \mathbf{r}} q(z(\mathbf{r}')) q(\mathbf{x}|\mathbf{z}) q(\boldsymbol{\psi})$,

$$\begin{aligned} \langle \log(p(\mathbf{y}|\mathbf{x}, \rho_\epsilon) p(\mathbf{x}|\mathbf{z}, \boldsymbol{\eta}, \boldsymbol{\rho})) \rangle_{q(/z(rb))} &\propto -\frac{1}{2} \left(\langle \rho_\kappa^{-1} \eta_\kappa^2 \rangle_{q(/z(rb))} - \langle \log(\rho_\kappa) \rangle \right. \\ &\quad \left. + \left\langle \left(\rho_\kappa^{-1} + \sum_{\mathbf{r}'} h^2(\mathbf{r}', \mathbf{r}) \right) x^2(\mathbf{r}) \right\rangle_{q(/z(rb))} \right. \\ &\quad \left. + \left\langle \left(\rho_\kappa^{-1} \eta_\kappa + \rho_\epsilon^{-1} \sum_{\mathbf{r}'} h(\mathbf{r}', \mathbf{r}) \left[y(\mathbf{r}') - \sum_{\mathbf{r}'' \neq \mathbf{r}} h(\mathbf{r}', \mathbf{r}'') x(\mathbf{r}') \right] \right) x(\mathbf{r}) \right\rangle_{q(/z(rb))} \right). \end{aligned} \quad (\text{C.15})$$

En complétant la dernière équation en forme quadratique en $x(\mathbf{r})$, on trouve :

$$\begin{aligned} \langle \log(p(\mathbf{y}|\mathbf{x}, \rho_\epsilon) p(\mathbf{x}|\mathbf{z}, \boldsymbol{\eta}, \boldsymbol{\rho})) \rangle_{q(/z(rb))} &\propto -\frac{1}{2} \left(\Psi(\tilde{\gamma}_\kappa) - \log(\tilde{\phi}_\kappa) + \log(\tilde{v}_{x,\kappa}^n(\mathbf{r})) \right. \\ &\quad \left. + \frac{[(\tilde{m}_{x,\kappa}^n(\mathbf{r}) - \tilde{m}_{x,\kappa}(\mathbf{r}))^2 - (\tilde{m}_{x,\kappa}^n(\mathbf{r}))^2]}{\tilde{v}_{x,\kappa}^n(\mathbf{r})} \right. \\ &\quad \left. + \overline{\rho_\kappa^{-1}} \left[\frac{1 - \tilde{\mathcal{C}}_\kappa(\mathbf{r})}{N_{\mathcal{V}}^2} \left[\left(\sum_{\mathbf{r}' \in \mathcal{V}(\mathbf{r})} \tilde{m}_{x,\kappa}(\mathbf{r}') \right)^2 + \tilde{v}_{x,\kappa}(\mathbf{r}') \right] + \tilde{\mathcal{C}}_\kappa(\mathbf{r}) [\tilde{\eta}_\kappa^2 + \tilde{\tau}_\kappa] \right] \right) \end{aligned} \quad (\text{C.16})$$

et

$$\langle p(\mathbf{z}|\Upsilon) \rangle = 2\Upsilon \sum_{\mathbf{r}' \in \mathcal{V}(\mathbf{r})} \sum_{\kappa'} q(z(\mathbf{r}') = \kappa') \delta(\kappa' - \kappa) = 2\Upsilon \sum_{\mathbf{r}' \in \mathcal{V}(\mathbf{r})} \tilde{\zeta}_\kappa(\mathbf{r}'), \quad (\text{C.17})$$

$$\begin{aligned}
 \log(\tilde{\zeta}_\kappa(\mathbf{r})) &\propto -\frac{1}{2} \left(\Psi(\tilde{\gamma}_\kappa) - \log(\tilde{\phi}_\kappa) + \log(\tilde{v}_{x,\kappa}^n(\mathbf{r})) + \frac{[(\tilde{m}_{x,\kappa}^n(\mathbf{r}) - \tilde{m}_{x,\kappa}(\mathbf{r}))^2 - (\tilde{m}_{x,\kappa}^n(\mathbf{r}))^2]}{\tilde{v}_{x,\kappa}^n(\mathbf{r})} \right. \\
 &\quad \left. + \overline{\rho_\kappa^{-1}} \left[\frac{1 - \tilde{\mathcal{C}}_\kappa(\mathbf{r})}{N_{\mathcal{V}}^2} \left[\left(\sum_{\mathbf{r}' \in \mathcal{V}(\mathbf{r})} \tilde{m}_{x,\kappa}(\mathbf{r}') \right)^2 + \tilde{v}_{x,\kappa}(\mathbf{r}') \right] + \tilde{\mathcal{C}}_\kappa(\mathbf{r}) [\tilde{\eta}_\kappa^2 + \tilde{\tau}_\kappa] \right] \right) \\
 &\quad + 2\Upsilon \sum_{\mathbf{r}' \in \mathcal{V}(\mathbf{r})} \tilde{\zeta}_\kappa(\mathbf{r}'). \quad (\text{C.18})
 \end{aligned}$$

C.3 Hyper-paramètres

C.3.1 Variance du bruit

$$\begin{aligned}
 \log(q(\rho_\epsilon)) &\propto \left\langle \frac{-M}{2} \log(\rho_\epsilon) - \frac{\|\mathbf{y} - \mathbf{H}\mathbf{x}\|_2^2}{2\rho_\epsilon} - \frac{\gamma_\epsilon}{\rho_\epsilon} - (\phi_\epsilon + 1) \log(\rho_\epsilon) \right\rangle_{q(/ \rho_\epsilon)} \\
 &\propto \left(\phi_\epsilon + 1 + \frac{M}{2} \right) \log(\rho_\epsilon) + \rho_\epsilon^{-1} \left\langle \frac{\|\mathbf{y} - \mathbf{H}\mathbf{x}\|_2^2}{2} + \gamma_\epsilon \right\rangle_{q(/ \rho_\epsilon)}, \quad (\text{C.19})
 \end{aligned}$$

où $q(/ \rho_\epsilon) = q(\mathbf{x}, \mathbf{z}) \prod_{l \neq \rho_\epsilon} q(\psi_l)$ et

$$\begin{aligned}
 \langle \|\mathbf{y} - \mathbf{H}\mathbf{x}\|_2^2 \rangle_{q(/ \rho_\epsilon)} &= \sum_{\mathbf{r}} y^2(\mathbf{r}) - 2 \sum_{\mathbf{r}} y(\mathbf{r}) \sum_{\mathbf{r}'} h(\mathbf{r}, \mathbf{r}') \sum_{\kappa} \tilde{\zeta}_\kappa(\mathbf{r}) \tilde{m}_{x,\kappa}(\mathbf{r}) \\
 &\quad + \sum_{\mathbf{r}} \left(\sum_{\mathbf{r}'} h^2(\mathbf{r}, \mathbf{r}') \sum_{\kappa} \tilde{\zeta}_\kappa(\mathbf{r}) (\tilde{m}_{x,\kappa}^2(\mathbf{r}) + \tilde{v}_{x,\kappa}(\mathbf{r})) \right. \\
 &\quad \left. + \sum_{\mathbf{r}'} \sum_{\mathbf{r}'' \neq \mathbf{r}'} h(\mathbf{r}, \mathbf{r}'') h(\mathbf{r}, \mathbf{r}') \sum_{\kappa} \tilde{\zeta}_\kappa(\mathbf{r}') \tilde{m}_{x,\kappa}(\mathbf{r}') \sum_{\kappa} \tilde{\zeta}_\kappa(\mathbf{r}'') \tilde{m}_{x,\kappa}(\mathbf{r}'') \right). \quad (\text{C.20})
 \end{aligned}$$

Ceci donne une loi inverse-gamma $q(\rho_\epsilon) = \mathcal{IG}(\tilde{\gamma}_\epsilon, \tilde{\phi}_\epsilon)$ avec les paramètres de forme suivants :

$$\tilde{\phi}_\epsilon = \phi_\epsilon + \frac{M}{2}, \quad (\text{C.21})$$

$$\tilde{\gamma}_\epsilon = \gamma_\epsilon + \frac{1}{2} \left(\|\mathbf{y}\|_2^2 + \|\mathbf{H}\tilde{\mathbf{m}}_x\|_2^2 - 2\mathbf{y}^t \mathbf{H}\tilde{\mathbf{m}}_x + \Gamma_{\mathbf{H}}^t \tilde{\mathbf{v}}_x + \|\Gamma_{\mathbf{H}} \circ (\tilde{\mathbf{m}}_{x2} - \tilde{\mathbf{m}}_x^2)\|_1 \right), \quad (\text{C.22})$$

où

$$\tilde{\mathbf{m}}_x = \sum_{\kappa} \tilde{\zeta}_\kappa \circ \tilde{\mathbf{m}}_{x,\kappa}, \quad (\text{C.23})$$

$$\tilde{\mathbf{m}}_{x2} = \sum_{\kappa} \tilde{\zeta}_\kappa \circ \tilde{\mathbf{m}}_{x,\kappa}^2, \quad (\text{C.24})$$

$$\tilde{\mathbf{v}}_x = \sum_{\kappa} \tilde{\zeta}_\kappa \circ \tilde{\mathbf{v}}_{x,\kappa}. \quad (\text{C.25})$$

C.3.2 Variances des classes

$$\begin{aligned} \forall \kappa \in \{1, \dots, K\}, \quad \log(q(\rho_\kappa)) &\propto - \left\langle \frac{1}{2} \sum_{\mathbf{r}} \delta(z(\mathbf{r}) = \kappa) \left(\log(\rho_\kappa) + \frac{|x(\mathbf{r}) - m_x(\mathbf{r})|^2}{\rho_\kappa} \right) \right. \\ &\quad \left. + \frac{\gamma_0}{\rho_\kappa} + (\phi_0 + 1) \log(\rho_\kappa) \right\rangle_{q(/ \rho_\kappa)} \\ &\propto - \left(\phi_0 + 1 + \frac{\sum_{\mathbf{r}} \tilde{\zeta}_\kappa(\mathbf{r})}{2} \right) \log(\rho_\kappa) - \rho_\kappa^{-1} \left\langle \gamma_0 + \frac{|x(\mathbf{r}) - m_x(\mathbf{r})|^2}{2} \right\rangle_{q(/ \rho_\kappa)}, \quad (\text{C.26}) \end{aligned}$$

avec $q(/ \rho_\kappa) = q(\mathbf{x}, \mathbf{z}) \prod_{l \neq \rho_\kappa} q(\psi_l)$ et

$$\begin{aligned} \langle |x(\mathbf{r}) - m_x(\mathbf{r})|^2 \rangle_{q(/ \rho_\kappa)} &= \tilde{\zeta}_\kappa(\mathbf{r}) \left(\tilde{m}_{x,\kappa}^2(\mathbf{r}) + \tilde{v}_{x,\kappa}(\mathbf{r}) + \tilde{\mathcal{C}}_\kappa(\mathbf{r}) (\tilde{\eta}_\kappa^2 + \tilde{\tau}_\kappa - 2\tilde{m}_{x,\kappa}\tilde{\eta}_\kappa) \right. \\ &\quad \left. + \frac{(1 - \tilde{\mathcal{C}}_\kappa(\mathbf{r}))}{2N_{\mathcal{V}}} \left(\sum_{\mathbf{r}' \in \mathcal{V}(\mathbf{r})} [\tilde{m}_{x,\kappa}(\mathbf{r}')]^2 + \sum_{\mathbf{r}' \in \mathcal{V}(\mathbf{r})} \tilde{v}_{x,\kappa}(\mathbf{r}') \right) \right. \\ &\quad \left. - \frac{2(1 - \tilde{\mathcal{C}}_\kappa(\mathbf{r})) \sum_{\mathbf{r}' \in \mathcal{V}(\mathbf{r})} \tilde{m}_{x,\kappa}(\mathbf{r}) \tilde{m}_{x,\kappa}(\mathbf{r}')}{2N_{\mathcal{V}}} \right). \quad (\text{C.27}) \end{aligned}$$

La forme conjuguée de l'*a priori* permet de retrouver une loi inverse-gamma pour la loi *a posteriori* approchante :

$$q(\rho_\kappa) = \mathcal{IG}(\tilde{\gamma}_\kappa, \tilde{\phi}_\kappa), \quad \forall \kappa \in \{1, \dots, K\} \quad (\text{C.28})$$

$$\tilde{\phi}_\kappa = \phi_0 + \frac{\sum_{\mathbf{r}} \tilde{\zeta}_\kappa(\mathbf{r})}{2} \quad (\text{C.29})$$

$$\tilde{\gamma}_\kappa = \gamma_0 + \frac{1}{2} \sum_{\mathbf{r}} \tilde{\zeta}_\kappa(\mathbf{r}) [\tilde{m}_{x,\kappa}(\mathbf{r})^2 + \tilde{v}_{x,\kappa}(\mathbf{r}) + \tilde{m}_{x,\kappa}^{\dagger 2} - 2\tilde{m}_{x,\kappa}^\dagger(\mathbf{r})\tilde{m}_{x,\kappa}(\mathbf{r})], \quad (\text{C.30})$$

avec

$$\tilde{m}_{x,\kappa}^{\dagger 2} = \frac{1 - \tilde{\mathcal{C}}_\kappa(\mathbf{r})}{N_{\mathcal{V}}} \left[\left(\sum_{\mathbf{r}' \in \mathcal{V}(\mathbf{r})} \tilde{m}_{x,\kappa}(\mathbf{r}') \right)^2 + \sum_{\mathbf{r}' \in \mathcal{V}(\mathbf{r})} \tilde{v}_{x,\kappa}(\mathbf{r}') \right] + \tilde{\mathcal{C}}_\kappa(\mathbf{r}) [\tilde{\eta}_\kappa^2 + \tilde{\tau}_\kappa]. \quad (\text{C.31})$$

C.3.3 Moyennes

$$\begin{aligned}
 \forall \kappa, \quad \log(q(\eta_\kappa)) &\propto - \left\langle \frac{1}{2} \sum_{\mathbf{r}} \delta(z(\mathbf{r}) = \kappa) \left(\frac{|x(\mathbf{r}) - m_x(\mathbf{r})|^2}{\rho_\kappa} \right) + \frac{|\eta_\kappa - \eta_0|^2}{\tau_0} \right\rangle_{q(/ \eta_\kappa)} \\
 &\propto - \frac{1}{2} \left(\left\langle \rho_\kappa^{-1} \delta(\mathbf{r}) \mathcal{C}(\mathbf{r}) + \tau_0^{-1} \right\rangle_{q(/ \eta_\kappa)} \eta_\kappa^2 \right. \\
 &\quad \left. - 2 \left\langle \frac{\eta_0}{\tau_0} + \frac{\sum_{\mathbf{r}} \delta(z(\mathbf{r}) = \kappa) \mathcal{C}_\kappa(\mathbf{r}) x(\mathbf{r})}{\rho_\kappa} \right\rangle_{q(/ \eta_\kappa)} \eta_\kappa \right), \quad (\text{C.32})
 \end{aligned}$$

où $q(/ \eta_\kappa) = q(\mathbf{x}, \mathbf{z}) \prod_{l \neq \eta_\kappa} q(\psi_l)$. Par conséquent, la loi *a posteriori* devient :

$$q(\eta_\kappa) = \mathcal{N}(\tilde{\eta}_\kappa, \tilde{\tau}_\kappa), \quad \forall \kappa \in \{1, \dots, K\}, \quad (\text{C.33})$$

$$\tilde{\tau}_\kappa = \left[\tau_0^{-1} + \overline{\rho_\kappa^{-1}} \sum_{\mathbf{r}} \tilde{\mathcal{C}}_\kappa(\mathbf{r}) \tilde{\zeta}_\kappa(\mathbf{r}) \right]^{-1}, \quad (\text{C.34})$$

$$\tilde{\eta}_\kappa = \tilde{\tau}_\kappa \left[\frac{\eta_0}{\tau_0} + \overline{\rho_\kappa^{-1}} \sum_{\mathbf{r}} \tilde{\mathcal{C}}_\kappa(\mathbf{r}) \tilde{\zeta}_\kappa(\mathbf{r}) \tilde{m}_{x,\kappa}(\mathbf{r}) \right]. \quad (\text{C.35})$$

C.4 Calcul des opérateurs

Dans les expressions des paramètres de forme des lois approchantes, on remarque l'utilisation des éléments de la matrice de projection \mathbf{H} . Néanmoins, cette matrice n'est pas calculée dans la plupart des applications pratiques à cause de sa grande dimension. Nous utilisons plutôt deux opérateurs, l'un direct et l'autre adjoint, pour remplacer le produit par la matrice ou sa transposée. Nous présentons par la suite, les équivalents des termes dépendants de la matrice de projection en fonction des opérateurs direct et adjoint.

L'opérateur direct remplace le produit du contraste par la matrice de projection :

$$\mathcal{D}_X(\mathbf{x}) = \mathbf{H}\mathbf{x}. \quad (\text{C.36})$$

Pour sa part, l'opérateur adjoint calcule la rétro-projection des données :

$$\mathcal{T}_X(\mathbf{y}) = \mathbf{H}^t \mathbf{y}. \quad (\text{C.37})$$

Finalement, le calcul de l'opérateur de variance $\Gamma_{\mathbf{H}}$ se fait de la manière suivante :

$$\Gamma_{\mathbf{H}}(\mathbf{r}) = \sum_{\mathbf{r}'} |h(\mathbf{r}', \mathbf{r})|^2 = \boldsymbol{\delta}_{\mathbf{r}}^t \mathcal{T}_X(\mathcal{D}_X(\boldsymbol{\delta}_{\mathbf{r}})). \quad (\text{C.38})$$

C.5 Analogie avec une méthode de gradient

Nous montrons, dans cette partie, l'analogie des équations de mise à jour du contraste dans l'approche bayésienne variationnelle avec celle d'une méthode de gradient où le

pas et la direction de descente ont une interprétions en terme de moments statistiques (moyenne, variance,).

Prenons le cas linéaire avec un objet composé d'une seule classe et un modèle *MGI* pour simplifier les équations. L'équation de mise à jour du contraste s'écrit sous la forme (eq. C.13) :

$$\tilde{\mathbf{m}}_x^n = \tilde{\mathbf{m}}_x + \tilde{\mathbf{V}}_x^n \left(\overline{\rho_\epsilon^{-1}} \mathbf{H}^t (\mathbf{y} - \mathbf{H} \tilde{\mathbf{m}}_x) + \overline{\rho_\kappa^{-1}} (\tilde{\eta}_\kappa - \tilde{\mathbf{m}}_x) \right). \quad (\text{C.39})$$

On peut donner une interprétation à cette dernière équation en l'écrivant sous la forme d'une mise à jour de type gradient :

$$\tilde{\mathbf{m}}_x^n = \tilde{\mathbf{m}}_x + \mathbf{a}_n \mathbf{d}_n, \quad (\text{C.40})$$

où le pas \mathbf{a}_n s'écrit sous la forme :

$$\mathbf{a}_n = - \left(\left\langle \frac{\partial^2 \log(p(\mathbf{x}, \boldsymbol{\psi}|\mathbf{y}))}{\partial \mathbf{x}^2} \right\rangle_q \right)^{-1} = \left(\overline{\rho_\epsilon^{-1}} \Gamma_{\mathbf{H}} + \overline{\rho_\kappa^{-1}} \right)^{-1} \quad (\text{C.41})$$

et la direction \mathbf{d}_n :

$$\mathbf{d}_n = \left\langle \frac{\partial \log(p(\mathbf{x}, \boldsymbol{\psi}|\mathbf{y}))}{\partial \mathbf{x}} \right\rangle_q = \overline{\rho_\epsilon^{-1}} \mathbf{H}^t (\mathbf{y} - \mathbf{H} \tilde{\mathbf{m}}_x) + \overline{\rho_\kappa^{-1}} (\tilde{\eta}_\kappa - \tilde{\mathbf{m}}_x). \quad (\text{C.42})$$

Cette propriété de l'approche bayésienne variationnelle a été démontrée pour la première fois dans [Sat01] pour les applications en apprentissage de modèles.

Détails de calcul de vbCSMGI et vbCSMGM

D.1 Courants induits

$$\begin{aligned}
 \log(q(w(\mathbf{r}))) &\propto \langle \log(p(\mathbf{w}, \mathbf{x}, \mathbf{z}, \boldsymbol{\psi}, \mathbf{y})) \rangle_{\prod_{\mathbf{r}' \neq \mathbf{r}} q(w(\mathbf{r}')) q(\mathbf{x}) q(\mathbf{z}) q(\boldsymbol{\psi})} \\
 &\propto \langle \log(p(\mathbf{y}|\mathbf{w}, \rho_\epsilon)) + \log(p(\mathbf{w}|\mathbf{x}, \rho_\xi)) \rangle_{\prod_{\mathbf{r}' \neq \mathbf{r}} q(w(\mathbf{r}')) q(\mathbf{x}) q(\mathbf{z}) q(\boldsymbol{\psi})} \\
 &\propto -\frac{1}{2} \left\langle \frac{\|\mathbf{y} - \mathbf{G}^o \mathbf{w}\|_2^2}{\rho_\epsilon} + \frac{\|\mathbf{w} - \mathbf{X} \mathbf{E}^o - \mathbf{X} \mathbf{G}^c \mathbf{w}\|_2^2}{\rho_\xi} \right\rangle_{q(/w(\mathbf{r}))}, \quad (\text{D.1})
 \end{aligned}$$

où $q(/w(\mathbf{r})) = \prod_{\mathbf{r}' \neq \mathbf{r}} q(w(\mathbf{r}')) q(\mathbf{x}) q(\mathbf{z}) q(\boldsymbol{\psi})$,

$$\begin{aligned}
 &\langle \|\mathbf{y} - \mathbf{G}^o \mathbf{w}\|_2^2 \rangle_{q(/w(\mathbf{r}))} \\
 &= \|\mathbf{y}\|_2^2 - 2\Re e \left(\sum_{\mathbf{r}'} y(\mathbf{r}') \sum_{\mathbf{r}'' \neq \mathbf{r}} g^o(\mathbf{r}', \mathbf{r}'') \bar{w}(\mathbf{r}'') - 2 \sum_{\mathbf{r}'} y(\mathbf{r}') g^o(\mathbf{r}', \mathbf{r}) w(\mathbf{r}) \right) \\
 &+ \left\langle \sum_{\mathbf{r}'''} \sum_{\mathbf{r}' \neq \mathbf{r}} \sum_{\mathbf{r}'' \neq \mathbf{r}} w^*(\mathbf{r}') g^{o*}(\mathbf{r}''', \mathbf{r}') g^o(\mathbf{r}''', \mathbf{r}'') w(\mathbf{r}'') \right\rangle_{q(/w(\mathbf{r}))} \\
 &+ 2 \sum_{\mathbf{r}'''} h(\mathbf{r}''', \mathbf{r}) \left(\sum_{\mathbf{r}' \neq \mathbf{r}} \bar{x}(\mathbf{r}') h(\mathbf{r}''', \mathbf{r}') \right) h(\mathbf{r}''', \mathbf{r}) x(\mathbf{r}) + \sum_{\mathbf{r}'''} |g^o(\mathbf{r}''', \mathbf{r})|^2 |w(\mathbf{r})|^2 \\
 &= \sum_{\mathbf{r}'''} |g^o(\mathbf{r}''', \mathbf{r})|^2 |w(\mathbf{r})|^2 \\
 &+ 2\Re e \left(\sum_{\mathbf{r}''} g^{o*}(\mathbf{r}'', \mathbf{r}) \left(y(\mathbf{r}'') - \sum_{\mathbf{r}' \neq \mathbf{r}} g^o(\mathbf{r}'', \mathbf{r}') \tilde{m}_w(\mathbf{r}') \right) w^*(\mathbf{r}) \right), \quad (\text{D.2})
 \end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
 \langle \|\mathbf{w} - \mathbf{X}\mathbf{E}^o - \mathbf{X}\mathbf{G}^c\mathbf{w}\|_2^2 \rangle_{q(w(\mathbf{r}))} &= |w(\mathbf{r})|^2 - g^{c*}(\mathbf{r}, \mathbf{r})\bar{x}^*(\mathbf{r})|w(\mathbf{r})|^2 - g^c(\mathbf{r}, \mathbf{r})\bar{x}(\mathbf{r})|w(\mathbf{r})|^2 \\
 &+ \sum_{\mathbf{r}'} |g^c(\mathbf{r}', \mathbf{r})| |\overline{x(\mathbf{r})}|^2 |w(\mathbf{r})|^2 - 2\Re(E^o(\mathbf{r})\bar{x}(\mathbf{r})w^*(\mathbf{r})) \\
 &+ 2\Re \left(\sum_{\mathbf{r}'} g^{c*}(\mathbf{r}', \mathbf{r}) \overline{x(\mathbf{r}')}^2 E^o(\mathbf{r}') w^*(\mathbf{r}) \right) \\
 &- 2\Re \left(\sum_{\mathbf{r}' \neq \mathbf{r}} \bar{x}(\mathbf{r}) g^c(\mathbf{r}, \mathbf{r}') \bar{w}(\mathbf{r}') w^*(\mathbf{r}) \right) \\
 &- 2\Re \left(\sum_{\mathbf{r}' \neq \mathbf{r}} g^{c*}(\mathbf{r}', \mathbf{r}) \bar{x}^*(\mathbf{r}') \bar{w}(\mathbf{r}') w^*(\mathbf{r}) \right) \\
 &+ 2\Re \left(\sum_{\mathbf{r}'} g^{c*}(\mathbf{r}', \mathbf{r}) \overline{x(\mathbf{r}')}^2 \sum_{\mathbf{r}'' \neq \mathbf{r}} g^c(\mathbf{r}', \mathbf{r}'') \bar{w}(\mathbf{r}'') w^*(\mathbf{r}) \right) \\
 &+ cte.
 \end{aligned} \tag{D.3}$$

En regroupant les différents termes, la loi approchante devient une gaussienne $q(w(\mathbf{r})) = \mathcal{N}(\tilde{m}_w(\mathbf{r}), \tilde{v}_w(\mathbf{r}))$ avec :

$$\begin{aligned}
 \tilde{v}_w(\mathbf{r}) &= \left[\overline{\rho_\epsilon^{-1}} \left(\sum_{\mathbf{r}'} |g^o(\mathbf{r}', \mathbf{r})|^2 \right) \right. \\
 &\left. + \overline{\rho_\xi^{-1}} \left(1 - 2\Re(g^c(\mathbf{r}, \mathbf{r})\tilde{m}_x(\mathbf{r})) + \sum_{\mathbf{r}'} |g^c(\mathbf{r}', \mathbf{r})|^2 (|\tilde{m}_x(\mathbf{r})|^2 + \tilde{v}_x(\mathbf{r})) \right) \right]^{-1},
 \end{aligned} \tag{D.4}$$

$$\begin{aligned}
 \tilde{m}_w(\mathbf{r}) &= \tilde{v}_w(\mathbf{r}) \left[\overline{\rho_\epsilon^{-1}} \sum_{\mathbf{r}''} g^{o*}(\mathbf{r}'', \mathbf{r}) \left(y(\mathbf{r}'') - \sum_{\mathbf{r}' \neq \mathbf{r}} g^o(\mathbf{r}'', \mathbf{r}') \tilde{m}_w(\mathbf{r}') \right) \right. \\
 &+ \overline{\rho_\xi^{-1}} \left(E^o(\mathbf{r})\tilde{m}_x(\mathbf{r}) - \sum_{\mathbf{r}'} g^{c*}(\mathbf{r}', \mathbf{r}) (|\tilde{m}_x(\mathbf{r}')|^2 + \tilde{v}_x(\mathbf{r}')) E^o(\mathbf{r}') \right. \\
 &+ \sum_{\mathbf{r}' \neq \mathbf{r}} \tilde{m}_x(\mathbf{r}) g^c(\mathbf{r}, \mathbf{r}') \tilde{m}_w(\mathbf{r}') + \sum_{\mathbf{r}' \neq \mathbf{r}} \tilde{m}_x^*(\mathbf{r}) g^{c*}(\mathbf{r}', \mathbf{r}) \tilde{m}_w(\mathbf{r}') \\
 &\left. \left. - \sum_{\mathbf{r}'} g^{c*}(\mathbf{r}', \mathbf{r}) (|\tilde{m}_x(\mathbf{r})|^2 + \tilde{v}_x(\mathbf{r})) \sum_{\mathbf{r}'' \neq \mathbf{r}} g^c(\mathbf{r}', \mathbf{r}'') \bar{w}(\mathbf{r}'') \right) \right].
 \end{aligned} \tag{D.5}$$

En conséquence, la loi jointe $q(\mathbf{w})$ sera une gaussienne multivariée. On donne les paramètres de forme à l'itération n en fonction des autres paramètres à l'itération $n-1$. Par souci de lisibilité, on ne marque pas l'indice de l'itération $n-1$:

$$q(\mathbf{w}) = \prod_{\mathbf{r}} q(w(\mathbf{r})) = \mathcal{N}(\tilde{\mathbf{m}}_w, \tilde{\mathbf{V}}_w), \tag{D.6}$$

$$\tilde{\mathbf{V}}_w^n = \left[\text{Diag} \left(\overline{\rho_\epsilon^{-1}} \Gamma^o + \overline{\rho_\xi^{-1}} \overline{\Gamma^{xc}} \right) \right]^{-1}, \tag{D.7}$$

$$\begin{aligned}
 \tilde{\mathbf{m}}_w^n &= \tilde{\mathbf{m}}_w + \left(\tilde{\mathbf{V}}_w^n \right) \left[\overline{\rho_\epsilon^{-1}} \mathbf{G}^{oH} (\mathbf{y} - \mathbf{G}^o \tilde{\mathbf{m}}_w) + \overline{\rho_\xi^{-1}} \left(\tilde{\mathbf{M}}_x \mathbf{E}^o - \mathbf{G}^{cH} (\tilde{\mathbf{M}}_x^2 + \tilde{\mathbf{V}}_x) \mathbf{E}^o \right. \right. \\
 &\left. \left. - \tilde{\mathbf{m}}_w + \tilde{\mathbf{M}}_x \mathbf{G}^c \tilde{\mathbf{m}}_w + \mathbf{G}^{cH} \tilde{\mathbf{M}}_x^* \tilde{\mathbf{m}}_w - \mathbf{G}^{cH} (\tilde{\mathbf{M}}_x^2 + \tilde{\mathbf{V}}_x) \mathbf{G}^c \tilde{\mathbf{m}}_w \right) \right],
 \end{aligned} \tag{D.8}$$

D.2 Contraste

$$\begin{aligned}
\log(q(x(\mathbf{r}))) &\propto \langle \log(p(\mathbf{w}, \mathbf{x}, \mathbf{z}, \boldsymbol{\psi}, \mathbf{y})) \rangle_{q(/x(\mathbf{r}))} \\
&\propto \langle \log(p(\mathbf{w}|\mathbf{x}, \rho_\xi)) + \log(p(\mathbf{x}|\mathbf{z}, \boldsymbol{\rho}, \boldsymbol{\eta})) \rangle_{q(/x(\mathbf{r}))} \\
&\propto -\frac{1}{2} \left\langle \frac{\|\mathbf{w} - \mathbf{X}\mathbf{E}\|_2^2}{\rho_\xi} + (\mathbf{x} - \mathbf{m}_x)^H \mathbf{V}_x^{-1} (\mathbf{x} - \mathbf{m}_x) \right\rangle_{q(/x(\mathbf{r}))}, \quad (\text{D.9})
\end{aligned}$$

où $q(/x(\mathbf{r})) = \prod_{\mathbf{r}' \neq \mathbf{r}} q(x(\mathbf{r}')) q(\mathbf{w}) q(\mathbf{z}) q(\boldsymbol{\psi})$,

$$\begin{aligned}
\langle \|\mathbf{w} - \mathbf{X}\mathbf{E}\|_2^2 \rangle_{q(/x(\mathbf{r}))} &= -2\Re e \left(\overline{w^*(\mathbf{r}) E(\mathbf{r})} x(\mathbf{r}) \right) + \overline{E^2(\mathbf{r})} |x(\mathbf{r})|^2 \\
&+ \left\langle \|\mathbf{w}\|_2^2 - 2\Re e \left(\sum_{\mathbf{r}' \neq \mathbf{r}} w^*(\mathbf{r}') E(\mathbf{r}') x(\mathbf{r}') \right) + \sum_{\mathbf{r}' \neq \mathbf{r}} |E(\mathbf{r}') x(\mathbf{r}')|^2 \right\rangle_{q(/x(\mathbf{r}))} \quad (\text{D.10})
\end{aligned}$$

et

$$\begin{aligned}
\left\langle (\mathbf{x} - \mathbf{m}_x)^t \mathbf{V}_x^{-1} (\mathbf{x} - \mathbf{m}_x) \right\rangle_{q(/x(\mathbf{r}))} &= \sum_{\mathbf{r}'} \left\langle \mathcal{C}_\kappa(\mathbf{r}) \frac{\|x(\mathbf{r}') - \eta_\kappa\|_2^2}{\rho_\kappa} \right\rangle_{q(/x(\mathbf{r}))} \\
&+ \left\langle \sum_{\mathbf{r}'} (1 - \mathcal{C}_\kappa(\mathbf{r})) \frac{\sum_{\mathbf{r}''} \|x(\mathbf{r}') - x(\mathbf{r}'')\|_2^2}{2N_V \rho_\kappa} \right\rangle_{q(/x(\mathbf{r}))} \\
&= \overline{\rho_\kappa^{-1}} \left(|x(\mathbf{r})|^2 - 2\Re e \left(\left(\tilde{\mathcal{C}}_\kappa(\mathbf{r}) \tilde{\eta}_\kappa + \frac{1 - \tilde{\mathcal{C}}_\kappa(\mathbf{r})}{N_V} \sum_{\mathbf{r}'' \in \mathcal{V}(\mathbf{r})} \bar{x}(\mathbf{r}'') \right) x^*(\mathbf{r}) \right) \right) \\
&+ cte, \quad (\text{D.11})
\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
\log(q(x(\mathbf{r}))) &\propto \left(\overline{\rho_\kappa^{-1}} + \overline{\rho_\xi^{-1} E^2(\mathbf{r})} \right) |x(\mathbf{r})|^2 \\
&- 2\Re e \left(\left(\overline{\rho_\xi^{-1} w(\mathbf{r}) E^*(\mathbf{r})} + \sum_{\kappa} \overline{\rho_\kappa^{-1} \tilde{\zeta}_\kappa(\mathbf{r}) \tilde{m}_x^\dagger} \right) x^*(\mathbf{r}) \right). \quad (\text{D.12})
\end{aligned}$$

Par identification, on trouve :

$$q(x(\mathbf{r})) = \mathcal{N}(\tilde{m}_x(\mathbf{r}), \tilde{v}_x(\mathbf{r})), \quad (\text{D.13})$$

où

$$\tilde{v}_x(\mathbf{r}) = \left[\overline{\rho_\xi^{-1} E^2(\mathbf{r})} + \overline{v_x^{-1}(\mathbf{r})} \right]^{-1}, \quad (\text{D.14})$$

$$\tilde{m}_x(\mathbf{r}) = (\tilde{v}_x(\mathbf{r})) \left[\overline{\left(\frac{m_x(\mathbf{r})}{v_x(\mathbf{r})} \right)} + \overline{\rho_\xi^{-1} w(\mathbf{r}) E^*(\mathbf{r})} \right], \quad (\text{D.15})$$

avec

$$\begin{aligned}
\overline{E^2(\mathbf{r})} &= \sum_{N_v, N_f, N_P} |E^o(\mathbf{r})|^2 + 2\Re e(\mathbf{E}^{o*}(\mathbf{r}) \mathbf{G}^c \tilde{\mathbf{m}}_w(\mathbf{r})) \\
&+ \left| \sum_{\mathbf{r}'} g^c(\mathbf{r}, \mathbf{r}') \tilde{m}_w(\mathbf{r}') \right|^2 + \sum_{\mathbf{r}'} |g^c(\mathbf{r}, \mathbf{r}')|^2 \tilde{v}_w(\mathbf{r}'), \quad (\text{D.16})
\end{aligned}$$

et

$$\overline{w(\mathbf{r})E^*(\mathbf{r})} = \sum_{N_v, N_f, N_P} E^{o*}(\mathbf{r})\tilde{m}_w(\mathbf{r}) + \tilde{m}_w(\mathbf{r}) \sum_{\mathbf{r}'} g^{c*}(\mathbf{r}, \mathbf{r}')\tilde{m}_w^*(\mathbf{r}') + g^{c*}(\mathbf{r}, \mathbf{r})\tilde{v}_w(\mathbf{r}). \quad (\text{D.17})$$

La loi jointe du contraste $q(\mathbf{x})$ devient :

$$q(\mathbf{x}) = \prod_{\mathbf{r}} q(x(\mathbf{r})) = \mathcal{N}(\tilde{\mathbf{m}}_x, \tilde{\mathbf{V}}_x), \quad (\text{D.18})$$

$$\tilde{\mathbf{V}}_x^n = \left[\text{Diag} \left(\overline{\rho_\xi^{-1}} \overline{\mathbf{E}^2} + \overline{\mathbf{V}_x^{-1}} \right) \right]^{-1}, \quad (\text{D.19})$$

$$\tilde{\mathbf{m}}_x^n = (\tilde{\mathbf{V}}_x^n) \left[\sum_{\kappa} \overline{\rho_\kappa^{-1}} \tilde{\zeta}_\kappa \circ \tilde{\mathbf{m}}_x^\dagger + \overline{\rho_\xi^{-1}} \mathbf{w} \circ \mathbf{E}^* \right], \quad (\text{D.20})$$

avec

$$\tilde{m}_x^\dagger(\mathbf{r}) = \tilde{\mathcal{C}}_\kappa(\mathbf{r})\tilde{\eta}_\kappa + \frac{1 - \tilde{\mathcal{C}}_\kappa(\mathbf{r})}{N_{\mathcal{V}}} \sum_{\mathbf{r}' \in \mathcal{V}(\mathbf{r})} \tilde{m}_x(\mathbf{r}'). \quad (\text{D.21})$$

D.3 Champ caché

$$\begin{aligned} \log(q(z(\mathbf{r}) = \kappa)) &= \log(\tilde{\zeta}_\kappa(\mathbf{r})) \propto \langle p(\mathbf{x}|\mathbf{z}, \boldsymbol{\rho}, \boldsymbol{\eta})p(\mathbf{z}|\Upsilon) \rangle_{q(/z(\mathbf{r}))} \\ &- \left\langle \frac{1}{2} \log(\rho_\kappa) + \frac{\|x(\mathbf{r}) - m_x(\mathbf{r})\|_2^2}{2\rho_\kappa} - \Upsilon \sum_{\mathbf{r}'' \in \mathcal{V}(\mathbf{r})} \delta(z(\mathbf{r}'') - \kappa) \right\rangle_{q(/z(\mathbf{r}))} \\ &\propto -\frac{1}{2} \left(\overline{\log(\rho_\kappa)} + \overline{\rho_\kappa^{-1}} \langle \|x(\mathbf{r}) - m_x(\mathbf{r})\| \rangle_{q(/z(\mathbf{r}))} - 2\Upsilon \sum_{\mathbf{r}' \in \mathcal{V}(\mathbf{r})} \tilde{\zeta}_\kappa(\mathbf{r}') \right) \\ &\propto -\frac{1}{2} \left(\Psi(\tilde{\gamma}_\kappa) - \log(\tilde{\phi}_\kappa) + \overline{\rho_\kappa^{-1}} [|\tilde{m}_x(\mathbf{r})|^2 + \tilde{m}_x^{\dagger 2} - 2\Re(\tilde{m}_x^\dagger \tilde{m}_x^*(\mathbf{r})) + \tilde{v}_x(\mathbf{r})] \right) \\ &\quad + \Upsilon \sum_{\mathbf{r}' \in \mathcal{V}(\mathbf{r})} \tilde{\zeta}_\kappa(\mathbf{r}'), \quad (\text{D.22}) \end{aligned}$$

avec $q(/z(\mathbf{r})) = \prod_{\mathbf{r}' \neq \mathbf{r}} q(z(\mathbf{r}'))q(\mathbf{w})q(\mathbf{x})q(\boldsymbol{\psi})$ et

$$\tilde{m}_x^{\dagger 2} = \frac{1 - \tilde{\mathcal{C}}_\kappa(\mathbf{r})}{N_{\mathcal{V}}^2} \left[\left| \sum_{\mathbf{r}' \in \mathcal{V}(\mathbf{r})} \tilde{m}_x(\mathbf{r}') \right|^2 + \sum_{\mathbf{r}' \in \mathcal{V}(\mathbf{r})} \tilde{v}_x(\mathbf{r}') \right] + \tilde{\mathcal{C}}_\kappa(\mathbf{r}) [\tilde{\eta}_\kappa^2 + \tilde{\tau}_\kappa]. \quad (\text{D.23})$$

D.4 Hyper-paramètres

D.4.1 Variance du bruit

Observation

$$\begin{aligned}
\log(q(\rho_\epsilon)) &\propto \langle p(\mathbf{y}|\mathbf{w}, \rho_\epsilon) p(\rho_\epsilon|\gamma_\epsilon, \phi_\epsilon) \rangle_{q(/ \rho_\epsilon)} \\
&\propto \left\langle \frac{-M}{2} \log(\rho_\epsilon) - \frac{\|\mathbf{y} - \mathbf{G}^o \mathbf{w}\|_2^2}{2\rho_\epsilon} - \frac{\gamma_\epsilon}{\rho_\epsilon} - (\phi_\epsilon + 1) \log(\rho_\epsilon) \right\rangle_{q(/ \rho_\epsilon)} \\
&\propto - \left(1 + \phi_\epsilon + \frac{M}{2} \right) \log(\rho_\epsilon) - \rho_\epsilon^{-1} \left\langle \left(\gamma_\epsilon + \frac{\|\mathbf{y} - \mathbf{G}^o \mathbf{w}\|_2^2}{2} \right) \right\rangle_{q(/ \rho_\epsilon)}, \quad (\text{D.24})
\end{aligned}$$

avec $q(/ \rho_\epsilon) = q(\mathbf{w})q(\mathbf{x})q(\mathbf{z}) \prod_{l \neq \rho_\epsilon} q(\psi_l)$ et

$$\begin{aligned}
\langle \|\mathbf{y} - \mathbf{G}^o \mathbf{w}\|_2^2 \rangle_{q(/ \rho_\epsilon)} &= \sum_{\mathbf{r}} \left(|y(\mathbf{r})|^2 + \sum_{\mathbf{r}'} \sum_{\mathbf{r}''} g^o(\mathbf{r}, \mathbf{r}') g^{o*}(\mathbf{r}, \mathbf{r}'') \tilde{m}_w(\mathbf{r}') \tilde{m}_w^*(\mathbf{r}'') \right. \\
&\quad \left. + \sum_{\mathbf{r}'} |g^o(\mathbf{r}, \mathbf{r}')|^2 \tilde{v}_w(\mathbf{r}') - 2\Re \left(y^* \sum_{\mathbf{r}'} g^o(\mathbf{r}, \mathbf{r}') \tilde{m}_w(\mathbf{r}') \right) \right). \quad (\text{D.25})
\end{aligned}$$

Ceci donne une loi inverse-gamma $q(\rho_\epsilon) = \mathcal{IG}(\tilde{\gamma}_\epsilon, \tilde{\phi}_\epsilon)$ dont les paramètres de forme sont :

$$\tilde{\phi}_\epsilon = \phi_\epsilon + \frac{M}{2}, \quad (\text{D.26})$$

$$\tilde{\gamma}_\epsilon = \gamma_\epsilon + \frac{1}{2} \left(\|\mathbf{y}\|_2^2 + \|\mathbf{G}^o \tilde{\mathbf{m}}_w\|_2^2 - 2\Re(\mathbf{y}^H \mathbf{G}^o \tilde{\mathbf{m}}_w) + \|\mathbf{G}^{o2} \tilde{\mathbf{v}}_w\|_1 \right). \quad (\text{D.27})$$

Couplage

$$\begin{aligned}
\log(q(\rho_\xi)) &\propto \langle p(\mathbf{w}|\mathbf{x}, \rho_\xi) p(\rho_\xi|\gamma_\xi, \phi_\xi) \rangle_{q(/ \rho_\xi)} \\
&\propto \left\langle \log \left(\rho_\xi^{\frac{-N_p N_v N_f N}{2}} \right) - \frac{\|\mathbf{w} - \mathbf{X} \mathbf{E}\|_2^2}{2\rho_\xi} - \frac{\gamma_\xi}{\rho_\xi} - (\phi_\xi + 1) \log(\rho_\xi) \right\rangle_{q(/ \rho_\xi)} \\
&\propto - \left(\gamma_\xi + \frac{N_p N_v N_f N}{2} \right) \log(\rho_\xi) - \rho_\xi^{-1} \left\langle \gamma_\xi + \frac{\|\mathbf{w} - \mathbf{X} \mathbf{E}\|_2^2}{2} \right\rangle_{q(/ \rho_\xi)}, \quad (\text{D.28})
\end{aligned}$$

où $q(/ \rho_\xi) = q(\mathbf{w})q(\mathbf{x})q(\mathbf{z}) \prod_{l \neq \rho_\xi} q(\psi_l)$ et

$$\begin{aligned} \langle \|\mathbf{w} - \mathbf{X}\mathbf{E}\|_2^2 \rangle_{q(/ \rho_\xi)} &= \sum_{\mathbf{r}} \left(|\tilde{m}_w(\mathbf{r})|^2 + \tilde{v}_w(\mathbf{r}) + (|\tilde{m}_x(\mathbf{r})|^2 + \tilde{v}_w(\mathbf{r})) \overline{E^2(\mathbf{r})} \right. \\ &\quad \left. - 2\Re \left(\tilde{m}_x(\mathbf{r}) \overline{w^*(\mathbf{r}) E(\mathbf{r})} \right) \right). \end{aligned} \quad (\text{D.29})$$

On obtient une loi inverse-gamma $q(\rho_\xi) = \mathcal{IG}(\tilde{\gamma}_\xi, \tilde{\phi}_\xi)$ avec les paramètres de forme :

$$\tilde{\phi}_\xi = \phi_\xi + \frac{N_p N_v N_f N}{2}, \quad (\text{D.30})$$

$$\tilde{\gamma}_\xi = \gamma_\xi + \frac{1}{2} \left(\|\tilde{\mathbf{m}}_w\|_2^2 + \|\tilde{\mathbf{V}}_w\|_1 + \|(\tilde{\mathbf{M}}_x^2 + \tilde{\mathbf{V}}_x) \overline{\mathbf{E}^2}\|_1 - 2\Re \left(\tilde{\mathbf{m}}_x^H \overline{\mathbf{w} \circ \mathbf{E}^*} \right) \right), \quad (\text{D.31})$$

où les expressions de $\overline{\mathbf{E}^2}$ et $\overline{\mathbf{w}^* \circ \mathbf{E}}$ sont données dans (5.73) et (5.74).

D.4.2 Variances des classes

$$\begin{aligned} \forall \kappa \in \{1, \dots, K\}, \quad \log(q(\rho_\kappa)) &\propto - \left\langle \frac{1}{2} \sum_{\mathbf{r}} \delta(z(\mathbf{r}) = \kappa) \left(\log(\rho_\kappa) \right. \right. \\ &\quad \left. \left. + \frac{\mathcal{C}(\mathbf{r}) |x(\mathbf{r}) - \eta_\kappa|^2 + \frac{(1-\mathcal{C}(\mathbf{r}))}{2N_V} \sum_{\mathbf{r}' \in \mathcal{V}(\mathbf{r})} |x(\mathbf{r}) - x(\mathbf{r}')|^2}{\rho_\kappa} \right) + \frac{\gamma_0}{\rho_\kappa} + (\phi_0 + 1) \log(\rho_\kappa) \right\rangle_{q(/ \rho_\kappa)} \\ &\propto - \left(\phi_0 + 1 + \frac{\sum_{\mathbf{r}} \tilde{\zeta}_\kappa(\mathbf{r})}{2} \right) \\ &\quad - \rho_\kappa^{-1} \left\langle \gamma_0 + \frac{\mathcal{C}(\mathbf{r}) |x(\mathbf{r}) - \eta_\kappa|^2 + \frac{(1-\mathcal{C}(\mathbf{r}))}{2N_V} \sum_{\mathbf{r}' \in \mathcal{V}(\mathbf{r})} |x(\mathbf{r}) - x(\mathbf{r}')|^2}{2} \right\rangle_{q(/ \rho_\kappa)}, \end{aligned} \quad (\text{D.32})$$

avec $q(/ \rho_\kappa) = q(\mathbf{w})q(\mathbf{x})q(\mathbf{z}) \prod_{l \neq \rho_\kappa} q(\psi_l)$ et

$$\begin{aligned} \langle |x(\mathbf{r}) - m_x(\mathbf{r})|^2 \rangle_{q(/ \rho_\kappa)} &= \tilde{\zeta}_\kappa(\mathbf{r}) \left(\tilde{m}_x^2(\mathbf{r}) + \tilde{v}_x(\mathbf{r}) + \tilde{\mathcal{C}}_\kappa(\mathbf{r}) (\tilde{\eta}_\kappa^2 + \tilde{\tau}_\kappa - 2\tilde{m}_x \tilde{\eta}_\kappa) \right. \\ &\quad \left. + \frac{(1 - \tilde{\mathcal{C}}_\kappa(\mathbf{r}))}{N_V} \left(\sum_{\mathbf{r}' \in \mathcal{V}(\mathbf{r})} |\tilde{m}_x(\mathbf{r}')|^2 + \sum_{\mathbf{r}' \in \mathcal{V}(\mathbf{r})} (\tilde{v}_x(\mathbf{r}')) \right) \right. \\ &\quad \left. - \frac{2(1 - \tilde{\mathcal{C}}_\kappa(\mathbf{r})) \sum_{\mathbf{r}' \in \mathcal{V}(\mathbf{r})} \tilde{m}_x(\mathbf{r}) \tilde{m}_x(\mathbf{r}')}{N_V} \right). \end{aligned} \quad (\text{D.33})$$

La forme conjuguée de l'*a priori* permet de retrouver une loi inverse-gamma pour la loi

a posteriori approchante :

$$q(\rho_\kappa) = \mathcal{IG}(\tilde{\gamma}_\kappa, \tilde{\phi}_\kappa), \quad \forall \kappa \in \{1, \dots, K\}, \quad (\text{D.34})$$

$$\tilde{\phi}_\kappa = \phi_0 + \frac{\sum_{\mathbf{r}} \tilde{\zeta}_\kappa(\mathbf{r})}{2}, \quad (\text{D.35})$$

$$\begin{aligned} \tilde{\gamma}_\kappa = \gamma_0 + \frac{1}{2} \sum_{\mathbf{r}} \tilde{\zeta}_\kappa(\mathbf{r}) & \left[|\tilde{m}_x(\mathbf{r})|^2 + \tilde{v}_x(\mathbf{r}) + \tilde{\mathcal{C}}_\kappa(\mathbf{r})(\eta_\kappa^2 + \tilde{\tau}_\kappa) \right. \\ & \left. + \frac{(1 - \tilde{\mathcal{C}}_\kappa(\mathbf{r}))}{2N_{\mathcal{V}}} \sum_{\mathbf{r}' \in \mathcal{V}(\mathbf{r})} |\tilde{m}_x(\mathbf{r}')|^2 + \tilde{v}_x(\mathbf{r}') - 2\Re(\tilde{m}_x^\dagger(\mathbf{r})\tilde{m}_x^*(\mathbf{r})) \right]. \end{aligned} \quad (\text{D.36})$$

D.4.3 Moyenne

$$\begin{aligned} \forall \kappa, \quad \log(q(\eta_\kappa)) & \propto - \left\langle \frac{1}{2} \sum_{\mathbf{r}} \delta(z(\mathbf{r}) = \kappa) \left(\frac{|x(\mathbf{r}) - m_x(\mathbf{r})|^2}{\rho_\kappa} \right) + \frac{|\eta_\kappa - \eta_0|^2}{\tau_0} \right\rangle_{q(/ \eta_\kappa)} \\ & \propto - \frac{1}{2} \left(\left\langle \rho_\kappa^{-1} \delta(\mathbf{r}) \mathcal{C}(\mathbf{r}) + \tau_0^{-1} \right\rangle_{q(/ \eta_\kappa)} \eta_\kappa^2 \right. \\ & \quad \left. - 2 \left\langle \frac{\eta_0}{\tau_0} + \frac{\sum_{\mathbf{r}} \delta(z(\mathbf{r}) = \kappa) \mathcal{C}_\kappa(\mathbf{r}) x(\mathbf{r})}{\rho_\kappa} \right\rangle_{q(/ \eta_\kappa)} \eta_\kappa \right), \end{aligned} \quad (\text{D.37})$$

où $q(/ \eta_\kappa) = q(\mathbf{w})q(\mathbf{x})q(\mathbf{z}) \prod_{l \neq \eta_\kappa} q(\psi_l)$. Par conséquent, la loi *a posteriori* devient :

$$q(\eta_\kappa) = \mathcal{N}(\tilde{\eta}_\kappa, \tilde{\tau}_\kappa), \quad \forall \kappa \in \{1, \dots, K\}, \quad (\text{D.38})$$

$$\tilde{\tau}_\kappa = \left[\tau_0^{-1} + \overline{\rho_\kappa^{-1}} \sum_{\mathbf{r}} \tilde{\mathcal{C}}_\kappa(\mathbf{r}) \tilde{\zeta}_\kappa(\mathbf{r}) \right]^{-1}, \quad (\text{D.39})$$

$$\tilde{\eta}_\kappa = \tilde{\tau}_\kappa \left[\frac{\eta_0}{\tau_0} + \overline{\rho_\kappa^{-1}} \sum_{\mathbf{r}} \tilde{\mathcal{C}}_\kappa(\mathbf{r}) \tilde{\zeta}_\kappa(\mathbf{r}) \tilde{m}_x(\mathbf{r}) \right]. \quad (\text{D.40})$$

D.5 Calcul des opérateurs de couplage

Dans les équations décrivant les paramètres de forme des lois approchantes, on remarque l'utilisation des éléments de la matrice de couplage. Du point de vue pratique, cette matrice est jamais calculée à cause de ces grandes dimensions et le résultat du produit matrice-vecteur est calculé grâce à un opérateur fonctionnel. Dans le cas général, on a besoin de deux opérateurs, un opérateur direct $\mathcal{D}_C(\mathbf{x})$ qui calcule le résultat du produit entre la matrice de couplage et un vecteur \mathbf{x} et un opérateur adjoint $\mathcal{T}_C(\mathbf{y})$ qui calcule le résultat du produit entre la matrice transposée conjuguée de la matrice de couplage et un vecteur \mathbf{y} :

$$\mathcal{D}_C(\mathbf{x}) = \mathbf{G}^c \mathbf{x}, \quad (\text{D.41})$$

$$\mathcal{T}_C(\mathbf{y}) = \mathbf{G}^{cH} \mathbf{y}. \quad (\text{D.42})$$

En particulier, dans l'approche bayésienne variationnelle, on a besoin d'un autre opérateur qui exprime le couplage pour la variance. Il permet de calculer le produit entre le carré de la matrice de couplage et un vecteur de variance \mathbf{v} . Ces opérateurs, dépendent principalement du modèle direct et de la fonction de Green. On liste, dans ce qui suit, les formes des différents opérateurs avec quelques constantes pour les cas de l'imagerie 2D en polarisation TM et 3D dans l'espace libre et pour le cas de l'imagerie 2D en milieu stratifié.

D.5.1 Imagerie 2D en polarisation TM

On présente ici les différents opérateurs utilisés dans le cas de l'imagerie 2D en espace libre. Comme l'équation de couplage est de forme convolutionnelle, la matrice de couplage est diagonalisable dans le domaine de Fourier et l'opérateur direct peut s'écrire à l'aide de la transformée de Fourier discrète :

$$\mathcal{D}_C(\mathbf{w}) = \mathbf{G}^c \mathbf{w} = \mathcal{F}_2^{-1}(\mathcal{F}_2(\mathbf{G}^c) \circ \mathcal{F}_2(\mathbf{w})). \quad (\text{D.43})$$

De la même manière, l'hermitien de la matrice est équivalent à une corrélation et l'opérateur adjoint s'écrit comme :

$$\mathcal{T}_C(\mathbf{E}) = \mathbf{G}^{cH} \mathbf{E} = \mathcal{F}_2^{-1}(\mathcal{F}_2(\mathbf{G}^c)^* \circ \mathcal{F}_2(\mathbf{E})). \quad (\text{D.44})$$

En outre, on définit l'opérateur direct de variance $\mathcal{D}_{C^2}(\mathbf{v})$ à l'aide de la transformée de Fourier car la matrice a également une forme convolutionnelle :

$$\mathcal{D}_{C^2}(\mathbf{v}) = \mathbf{G}^{c2} \mathbf{v} = \mathcal{F}_2^{-1}(\mathcal{F}_2(\mathbf{G}^{c2}) \circ \mathcal{F}_2(\mathbf{v})) \quad (\text{D.45})$$

et les différentes constantes sont :

$$\text{Diag}(\mathbf{G}^c)(\mathbf{r}) = g^c(\mathbf{r}, \mathbf{r}) = G^c(\mathbf{0}), \quad (\text{D.46})$$

$$\Gamma^c(\mathbf{r}) = \sum_{\mathbf{r}'} |g^c(\mathbf{r}', \mathbf{r})|^2 = \boldsymbol{\delta}_r^t \mathcal{T}_C(\mathcal{D}_C(\boldsymbol{\delta}_r)). \quad (\text{D.47})$$

D.5.2 Imagerie 3D

Dans le cas de l'imagerie 3D en espace libre, l'opérateur direct garde une forme convolutionnelle pour chaque polarisation :

$$\mathcal{D}_C(\mathbf{w}_{P_j}) = \sum_{P_i} \mathcal{F}_3^{-1}(\mathcal{F}_3(\mathbf{G}_{P_j, P_i}^c) \circ \mathcal{F}_3(\mathbf{w}_{P_i})), \quad (\text{D.48})$$

où $P_j, P_i = P_x, P_y, P_z$ sont les différentes polarisations et l'opérateur adjoint s'écrit comme suit :

$$\mathcal{T}_C(\mathbf{E}_{P_j}) = \sum_{P_i} \mathcal{F}_3^{-1}(\mathcal{F}_3(\mathbf{G}_{P_j, P_i}^c)^* \circ \mathcal{F}_3(\mathbf{E}_{P_i})). \quad (\text{D.49})$$

L'opérateur direct de variance s'écrit :

$$\mathcal{D}_{C^2}(\mathbf{v}_{P_j}) = \sum_{P_i} \mathcal{F}_3^{-1}(\mathcal{F}_3(\mathbf{G}_{P_j, P_i}^{c2}) \circ \mathcal{F}_3(\mathbf{v}_{P_i})) \quad (\text{D.50})$$

et les constantes :

$$Diag(\mathbf{G}^c)(\mathbf{r}) = g_{P_i, P_i}^c(\mathbf{r}, \mathbf{r}) = G_{P_i, P_i}^c(\mathbf{0}), \quad (\text{D.51})$$

$$\Gamma_{P_i}^c(\mathbf{r}) = \sum_{\mathbf{r}', P_j} |g_{P_i, P_j}^c(\mathbf{r}', \mathbf{r})|^2 = \boldsymbol{\delta}_r^t \mathcal{T}_C(\mathcal{D}_C(\boldsymbol{\delta}_r)). \quad (\text{D.52})$$

D.5.3 Imagerie 2D en milieu stratifié

Dans un milieu stratifié, comme décrit dans 2.3.1, la matrice de couplage se décompose en deux parties, l'une convolutionnelle et l'autre corrélationnelle. Elle est toujours diagonalisable dans le domaine de Fourier mais avec un traitement particulier pour la partie corrélationnelle :

$$\mathcal{D}_C(\mathbf{w}) = \mathbf{G}^c \mathbf{w} = \mathbf{G}^{cs} \mathbf{w} + \mathbf{G}^{cr} \mathbf{w} \quad (\text{D.53})$$

$$= \mathcal{F}_2^{-1} \left(\mathcal{F}_2(\mathbf{G}^{cs}) \circ \mathcal{F}_2(\mathbf{w}) + \mathcal{F}_2(\mathbf{G}^{cr}) \circ \mathcal{F}_{a_y}(\mathcal{F}_{a_x}(\mathbf{w})^*)^* \right), \quad (\text{D.54})$$

où \mathbf{G}^{cs} , \mathbf{G}^{cr} sont les parties singulière et régulière de la fonction Green et où $\mathcal{T}_C(\mathbf{E})$ est l'opérateur adjoint :

$$\mathcal{T}_C(\mathbf{E}) = \mathbf{G}^{cH} \mathbf{E} = \mathcal{F}_2^{-1} \left(\mathcal{F}_2(\mathbf{G}^{cs})^* \circ \mathcal{F}_2(\mathbf{E}) + \mathcal{F}_2(\mathbf{G}^{cr}) \circ \mathcal{F}_{a_y}(\mathcal{F}_{a_x}(\mathbf{E})^*)^* \right). \quad (\text{D.55})$$

Cependant, l'opérateur de variance n'est pas diagonalisable dans le domaine de Fourier à cause du terme rassemblant la partie singulière et la partie régulière. Ceci nécessite un calcul explicite de la matrice sur l'axe perpendiculaire au substrat (a_y) :

$$\mathcal{D}_{C^2}(\mathbf{v}) = \mathbf{G}^{c^2} \mathbf{v} = \underbrace{\left(\mathbf{G}^{cs^2} + \mathbf{G}^{cr^2} \right)}_{\text{diagonalisable}} \mathbf{v} + 2\Re(\mathbf{G}^{cs*} \circ \mathbf{G}^{cr}) \mathbf{v}. \quad (\text{D.56})$$

Les constantes s'écrivent :

$$Diag(\mathbf{G}^c)(\mathbf{r}) = g^c(\mathbf{r}, \mathbf{r}) = G^{cs}(\mathbf{0}) + G^{cr}(0_x, 2r_y), \quad (\text{D.57})$$

$$\Gamma^c(\mathbf{r}) = \sum_{\mathbf{r}'} |g^c(\mathbf{r}', \mathbf{r})|^2 = \boldsymbol{\delta}_r^t \mathcal{T}_C(\mathcal{D}_C(\boldsymbol{\delta}_r)). \quad (\text{D.58})$$

Diffusion des résultats

Articles dans des revues internationales avec comité de lecture

- [A1] Hacheme Ayasso, Bernard Duchêne, and Ali Mohammad-Djafari. Bayesian inversion for optical diffraction tomography. *Journal of Modern Optics*, 57(9) :765–776, 2010.
- [A2] Hacheme Ayasso, Bernard Duchêne, and Ali Mohammad-Djafari. Optical diffraction tomography within a variational Bayesian framework. *Inverse Problems in Science and Engineering*, Accepted(9) :16, 2010.
- [A3] Hacheme Ayasso and Ali Mohammad-Djafari. Joint NDT image restoration and segmentation using Gauss–Markov–Potts prior models and variational Bayesian computation. *IEEE Transactions on Image Processing*, 19(9) :2265–2277, 2010.

Communications nationales et internationales avec actes

- [B1] Hacheme Ayasso, Bernard Duchêne, and Ali Mohammad-Djafari. Bayesian estimation with Gauss–Markov–Potts priors in optical diffraction tomography. In *SPIE, Electronic Imaging (to appear)*, San Francisco Airport, California, USA, January 2011.
- [B2] Hacheme Ayasso, Bernard Duchêne, and Ali Mohammad-Djafari. A variational Bayesian approach of inversion in optical diffraction tomography. In *Proceeding of the 11th Workshop on Optimization and Inverse Problems in Electromagnetism*, Sofia, Bulgaria, September 2010.
- [B3] Hacheme Ayasso, Bernard Duchêne, and Ali Mohammad-Djafari. A Bayesian approach to microwave imaging in a 3-D configuration. In *Proceeding of the 10th Workshop on Optimization and Inverse Problems in Electromagnetism*, pages 180–182, Ilmenau Allemagne, Spetember 2008.
- [B4] Hacheme Ayasso, Sofia Fekih Salem, and Ali Mohammad-Djafari. Approche variationnelle bayésienne pour la reconstruction tomographique. In *Actes du XXIIe Colloque GRETSI - Traitement du Signal et des Images*, pages ID465, 4 pages, Dijon France, September 2009.
- [B5] Hacheme Ayasso, Sofia Fekih Salem, and Ali Mohammad-Djafari. Variational Bayes approach for tomographic reconstruction. In *Proceedings of the 28th In-*

ternational Workshop on Bayesian Inference and Maximum Entropy Methods in Science and Engineering, MaxEnt, volume 1073, pages 243–251, Sao Paulo Brésil, November 2008.

- [B6] Hacheme Ayasso and Ali Mohammad-Djafari. Joint image restoration and segmentation using Gauss-Markov-Potts prior models and variational Bayesian computation. In *Proceeding of the 15th IEEE International Conference on Image Processing, (ICIP)*, pages 1297–1300, Égypte, 2009.
- [B7] Hacheme Ayasso and Ali Mohammad-Djafari. Variational Bayes with Gauss-Markov-Potts prior models for joint image restoration and segmentation. In *proceedings of the International Conference on Computer Vision Theory and Applications (VISAPP)*, pages 571–576, Funchal, Madeira Portugal, 2008.
- [B8] Ali Mohammad-Djafari and Hacheme Ayasso. Variational Bayes and mean field approximations for Markov field unsupervised estimation. In *Proceeding of IEEE International Workshop on Machine Learning for Signal Processing (MLSP)*, pages 1–6, Grenoble France, September 2009.

Communications nationales sans actes

- [C1] Hacheme Ayasso, Bernard Duchêne, and Ali Mohammad-Djafari. Approche bayésienne de l'inversion en imagerie micro-onde 3D. In *Les Journées d'Imagerie Optique Non-Conventionnelle (GDR Ondes & GDR Isis)*, Paris, France, 2010.
- [C2] Hacheme Ayasso, Bernard Duchêne, and Ali Mohammad-Djafari. Une approche bayésienne de l'inversion en tomographie optique par diffraction. In *Interférences d'Ondes, Assemblée Générale du GDR Ondes*, Paris, France, November 2009.
- [C3] Hacheme Ayasso, Bernard Duchêne, and Ali Mohammad-Djafari. Une approche bayésienne en tomographie micro-onde 3D. In *Les Journées d'Imagerie Optique Non-Conventionnelle (GDR Ondes & GDR Isis)*, Paris, France, March 2009.
- [C4] Hacheme Ayasso, Bernard Duchêne, and Ali Mohammad-Djafari. Approche bayésienne variationnelle en reconstruction d'image en tomographie. In *Journées Problèmes Inverses (GDR Isis)*, Paris France, March 2009.
- [C5] Hacheme Ayasso, Bernard Duchêne, and Ali Mohammad-Djafari. Imagerie micro-onde et application à la détection d'objets enfouis. In *Colloque Alain Bouyssy*, Orsay, France, February 2009.
- [C6] Hacheme Ayasso, Bernard Duchêne, and Ali Mohammad-Djafari. Bayesian approach for inverse problems in microwave tomography. In *Journées Problèmes Inverses et Optimisation de Forme*, Nantes, France, 2008.

Papier I

Bayesian inversion for optical diffraction tomography

Bayesian inversion for optical diffraction tomography

H. Ayasso*, B. Duchêne and A. Mohammad-Djafari

*Laboratoire des Signaux et Systèmes, UMR 8506, CNRS, Supélec, Université Paris-Sud 11,
3 rue Joliot-Curie, 91192 Gif-sur-Yvette Cedex, France*

(Received 23 October 2009; final version received 2 December 2009)

In this paper, optical diffraction tomography is considered as a non-linear inverse scattering problem and tackled within the Bayesian estimation framework. The object under test is a man-made object known to be composed of compact regions made of a finite number of different homogeneous materials. This a priori knowledge is appropriately translated by a Gauss–Markov–Potts prior. Hence, a Gauss–Markov random field is used to model the contrast distribution whereas a hidden Potts–Markov field accounts for the compactness of the regions. First, we express the a posteriori distributions of all the unknowns and then a Gibbs sampling algorithm is used to generate samples and estimate the posterior mean of the unknowns. Some preliminary results, obtained by applying the inversion algorithm to laboratory controlled data, are presented.

Keywords: optical diffraction tomography; Bayesian approach; hierarchical Markov fields; Gauss–Markov–Potts prior; Monte Carlo Markov chain and Gibbs sampling; non-linear inverse scattering problem

1. Introduction

The development of imaging systems able to provide 3D images with a resolution better than 100 nm is of considerable interest, especially in the nanotechnology and biology domains. Optical Diffraction Tomography (ODT) is a recent optical imaging technique that yields such images with a sub-wavelength resolution and that does not suffer from the drawbacks of imaging techniques such as electronic or atomic force microscopy that show better resolution but yield only surface images or such as optical near-field microscopy that requires the displacement of a probe at a very short distance from the object under test. The development of ODT has been made possible thanks to the appearance of interferometric techniques, such as phase-shifting holography [1], able to provide an accurate measurement of the phase of the fields. The latter have opened to optical imaging the field of inverse scattering reconstruction techniques used before in other domains, such as microwaves and ultrasonics, where accurate measurements of the phase have existed for a long time. An inverse scattering problem consists, in fact, in retrieving an object function (or contrast function) representative of the object physical parameters from measurements of the scattered field that results from the interaction between the object and a known interrogating (or incident) wave, through the inversion of a direct model that

expresses the scattered field as a function of the contrast.

Hence, optical imaging has naturally followed the way of diffraction tomography (DT) developed earlier in the two above-mentioned domains [2–5] and extensively studied in the 1980s. DT is based upon the generalized projection slice theorem, an extension to the weak scattering case of the projection slice theorem of classical computerized tomography, that relates the $(N - 1)$ D Fourier transform (where N is the dimension of the configuration, i.e. $N = 2$ or 3) of the scattered field to the ND Fourier transform of the object function over a circular arc or a spherical cap (the Ewald sphere) in the spatial frequency domain. Hence, the latter can be filled up by varying the incident direction and/or the frequency of the interrogating wave and, then, the object can be retrieved through a ND inverse Fourier transform. DT leads to fast reconstruction algorithms and yields good results in optical imaging of low-contrasted biological samples [6,7]. It suffers, however, from two major drawbacks: its resolution is limited as evanescent waves are neglected and it fails to provide quantitative information about objects with high dielectric contrasts [8,9] as it is based upon a weak scattering assumption (Born or Rytov approximations). This latter point is particularly penalizing in the nanotechnology domain, where the structures of interest are in the resonance domain

*Corresponding author. Email: hacheme.ayasso@lss.supelec.fr

with sizes of the same order of magnitude as the interrogating wavelength and dielectric contrasts that can be important and, thus, where multiple scattering cannot be neglected.

In the 1990s these drawbacks led researchers to cast off weak scattering approximations and to develop iterative algorithms able to handle the nonlinear problem at hand. The latter consists in the inversion of two coupled integral equations where, in addition to the contrast, the total field induced within the object appears also as unknown. In addition to being nonlinear, this problem is also well known to be ill-posed which means that a regularization of the latter is required prior to its resolution. This regularization is generally performed by accounting for any a priori information available on the object and the various inversion techniques can be distinguished from one another by the way they are used to introduce this information in the inversion process. A first class of methods developed in a deterministic framework looks for the solution through an iterative minimization of a cost functional that expresses the discrepancy between the data and the scattered fields computed by means of the current solution; the a priori information can then be introduced directly either in the expression of the sought contrast [10], or in the cost function by accounting for both of the two above-mentioned integral equations [11,12], or by including additional terms that express the smoothness of the solution [13,14], or the homogeneity of the sought object [15,16], or that preserve its contour [17]. Adaptation of nonlinear inversion methods of this class to optical imaging is very recent. Let us cite [18] among the pioneering works.

As for us, we are concerned, herein, with a second class of methods developed in a probabilistic estimation framework where the a priori information is introduced through a *Gauss–Markov–Potts model* [19,20]. Such a method has been developed and successfully applied in the framework of microwave imaging [21]. However, it can be noted that, in addition to the operating frequency band, the configuration considered herein is very different from the one considered in the former case: now, aspect-limited reflection data are available at a single frequency, whereas previously frequency-diverse quasi-complete data were available, which means that the scattered fields were measured all around the object for several illumination directions and several frequencies. The limited aspect of the data enhance the ill-posed nature of the inverse problem and makes the introduction of prior information more essential. The method presented herein is particularly well suited for this purpose as we consider man-made objects that are known to be composed of compact homogeneous regions made of a

finite number of different materials. Whereas taking into account such an a priori information is not straightforward with deterministic methods as soon as this number is greater than one, it is, on the contrary, really easy in the statistical framework of the Bayesian estimation [22]. In this framework, the marginal distribution of contrast can be modeled as a *Gaussian mixture* [23] where each Gaussian law represents a class of materials and the compactness of the regions can be accounted for by means of a hidden Markov model. A *Gibbs sampling algorithm* [24–26] can then be used to estimate the posterior means of the unknown variables. The interest of this method lies in the fact that we estimate not only the contrast distribution but also its segmentation in regions and the parameters (means and variances) of the contrast in each of the latter.

2. The experimental configuration

The data of the inverse problem (courtesy of G. Maire, A. Sentenac and K. Belkebir) used herein come from a laboratory controlled experiment led at the Institut Fresnel (Marseille, France). The experimental set-up is thoroughly described in [27]. An helium–neon laser, operating at a 633 nm wavelength, illuminates the object under test through a conventional reflection microscope that has been modified in order to measure the phase of the scattered fields by means of an interferometric technique. The objects considered herein are made of parallel resin rods of long extent lying on a silicon substrate. The substrate is of known relative permittivity and its dimensions are large as compared to that of the rods, so that the configuration is modeled as follows: an object made of resin, whose cross-section Ω is depicted in Figure 1, lies in the upper layer of a stratified medium made of two semi-infinite half-spaces separated by a planar interface γ_{12} . The upper half-space \mathcal{D}_1 is air and the lower one \mathcal{D}_2 is silicon. The different media are supposed to be lossless and they are characterized by their propagation constant k_m ($m=1, 2$ or Ω) so that $k_m^2 = \omega^2 \varepsilon_0 \varepsilon_m \mu_0$, where ω is the angular frequency, ε_0 ($\varepsilon_0 = 8.854 \times 10^{-12} \text{ F m}^{-1}$) and μ_0 ($\mu_0 = 4\pi \times 10^{-7} \text{ H m}^{-1}$) are the dielectric permittivity and the magnetic permeability of free space, respectively, and ε_m is the relative dielectric permittivity of medium \mathcal{D}_m ($\varepsilon_1 = 1$, $\varepsilon_2 = 15.07$ and $\varepsilon_\Omega = 2.66$). Let us note that ε_Ω is supposed to be unknown in the inversion process.

The object is supposed to be contained in a test domain \mathcal{D} ($\mathcal{D} \subset \mathcal{D}_1$) and we introduce a contrast function χ representative of its electromagnetic parameters, such that $\chi(\mathbf{r}) = k^2(\mathbf{r}) - k_1^2$, defined in \mathcal{D} and null outside Ω . The object is illuminated by an incident

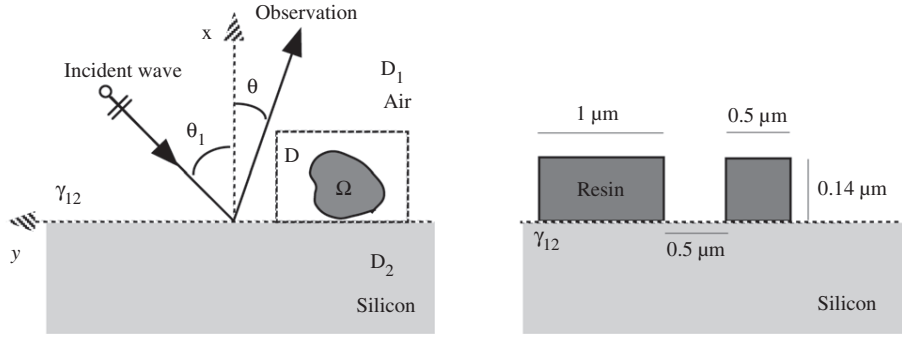


Figure 1. The geometry of the problem (left) and the details of the object under test (right).

wave whose implied time-dependence is chosen as $\exp(-i\omega t)$ and that can be considered as a plane wave whose electric field E^{inc} is polarized in the γ_{12} interface plane along the Oz axis parallel to the axis of the rods. The latter are supposed to be invariant along this axis so that a 2D configuration will be considered in a transverse magnetic polarization case, which leads to scalar field formulations. The direction of propagation of the incident wave θ_1 can be varied in the range $\pm 32^\circ$; hence N_v views are carried out at varying θ_1 ($N_v = 8$), each view being constituted of measurements of the scattered field in the far field domain \mathcal{S} at N_r different observation angles θ in the range $\pm 46^\circ$ ($N_r = 586$).

3. The forward model

3.1. The Green's function in stratified media

The modeling is based upon domain integral representations obtained by applying Green's theorem to the Helmholtz wave equations satisfied by the fields and by accounting for continuity and radiation conditions [28,29]. This leads to two coupled contrast-source integral equations that involve the Green's function of the stratified medium $\mathcal{G}(\mathbf{r}, \mathbf{r}')$, i.e. a fundamental solution which represents the radiation of a line source located at \mathbf{r}' and observed at \mathbf{r} in the absence of an object and which is known in the spectral domain associated with y [10,30]:

$$\mathcal{G}(\mathbf{r}, \mathbf{r}') = \frac{1}{2\pi} \int_{-\infty}^{+\infty} g(x, x', \alpha) \exp(i\alpha(y - y')) d\alpha. \quad (1)$$

Accounting for the fact that, herein, both the source (\mathbf{r}') and the observation (\mathbf{r}) locations are in medium \mathcal{D}_1 , the plane wave spectrum $g(x, x', \alpha)$ reads:

$$g(x, x', \alpha) = \frac{i}{2\beta_1} \left[\exp(i\beta_1|x - x'|) + \frac{\beta_1 - \beta_2}{\beta_1 + \beta_2} \exp(i\beta_1(x + x')) \right],$$

$$\beta_m = (k_m^2 - \alpha^2)^{1/2}, \quad \Im m(\beta_m) \geq 0, \quad m = 1, 2. \quad (2)$$

It is made of two terms whose first one represents the direct contribution and whose second one accounts for reflection on the γ_{12} interface. It can be noted that the scattered fields are measured in the far field. In these conditions an approximation $\tilde{\mathcal{G}}$ of \mathcal{G} can be found by means of the method of stationary phase [31]. Hence, by accounting for the fact that the fields are measured in directions θ such that $x > x'$, (1) can be rewritten as:

$$\tilde{\mathcal{G}}(\mathbf{r}, \mathbf{r}') = \frac{\zeta(\theta, \mathbf{r}')}{2\pi} \int_{-\infty}^{+\infty} \frac{i}{2\beta_1} \exp(i(\beta_1 x + \alpha y)) d\alpha, \quad (3)$$

with

$$\zeta(\theta, \mathbf{r}') = \left[\exp(-i\beta_1(\theta)x') + \frac{\beta_1(\theta) - \beta_2(\theta)}{\beta_1(\theta) + \beta_2(\theta)} \exp(i\beta_1(\theta)x') \right] \times \exp(-i\alpha(\theta)y'),$$

$$\alpha(\theta) = k_1 \sin(\theta), \quad \beta_m(\theta) = (k_m^2 - \alpha(\theta)^2)^{1/2}.$$

The spectral development that appears in the above expression is that of the free space Green's function in medium \mathcal{D}_1 , i.e. $iH_0^1(k_1 r)/4$ with $r = |\mathbf{r}|$ and H_0^1 the zero order Hankel function of the first kind. By introducing the asymptotic expansion of the latter for large arguments as we are in the far field, we finally get:

$$\tilde{\mathcal{G}}(\mathbf{r}, \mathbf{r}') = \frac{i\zeta(\theta, \mathbf{r}')}{4} \left(\frac{2}{\pi k_1} \right)^{1/2} \exp\left(\frac{-i\pi}{4}\right) \frac{\exp(-ik_1 r)}{r^{1/2}}. \quad (4)$$

Let us note that, as measurements are performed at constant r , from now on the r dependence of the above expression will be omitted and accounted for in the normalization coefficients, which finally leads to the approximated far-field Green's function $\tilde{\mathcal{G}}(\theta, \mathbf{r}')$:

$$\tilde{\mathcal{G}}(\theta, \mathbf{r}') = \frac{i\zeta(\theta, \mathbf{r}')}{4} \left(\frac{2}{\pi k_1} \right)^{1/2} \exp\left(\frac{-i\pi}{4}\right). \quad (5)$$

3.2. The observation and coupling equations

The forward model is described by two coupled integral equations that read as follows. The first one,

denoted as the *coupling* (or *state*) equation, relates the field E in \mathcal{D} to Huygens-type sources $w(\mathbf{r}')$ induced within the target by the incident wave, i.e. $w(\mathbf{r}') = \chi(\mathbf{r}')E(\mathbf{r}')$, where χ is the contrast function:

$$E(\mathbf{r}) = E^{\text{inc}}(\mathbf{r}) + \int_{\mathcal{D}} \mathcal{G}(\mathbf{r}, \mathbf{r}') w(\mathbf{r}') d\mathbf{r}', \quad \mathbf{r} \in \mathcal{D}. \quad (6)$$

E^{inc} is the incident field, i.e. the field that would exist in the absence of the object:

$$\begin{aligned} E^{\text{inc}}(\mathbf{r}) &= \exp(-ik_1(x \cos(\theta_1) + y \sin(\theta_1)) \\ &\quad + R \exp(ik_1(x \cos(\theta_1) - y \sin(\theta_1))), \quad \mathbf{r} \in \mathcal{D} \\ R &= \frac{k_1 \cos(\theta_1) - k_2 \cos(\theta_2)}{k_1 \cos(\theta_1) + k_2 \cos(\theta_2)}, \\ &\quad \text{with } \theta_2 \text{ such that } k_1 \sin(\theta_1) = k_2 \sin(\theta_2). \end{aligned} \quad (7)$$

The coupling Equation (6) can be rewritten in order to express the induced sources. This yields:

$$w(\mathbf{r}) = \chi(\mathbf{r})E^{\text{inc}}(\mathbf{r}) + \chi(\mathbf{r}) \int_{\mathcal{D}} \mathcal{G}(\mathbf{r}, \mathbf{r}') w(\mathbf{r}') d\mathbf{r}', \quad \mathbf{r} \in \mathcal{D}. \quad (8)$$

The second equation is a Fredholm integral equation of the first kind denoted as the *observation* equation. It relates the scattered field E^{dif} observed in the direction θ to the induced sources $w(\mathbf{r}')$:

$$E^{\text{dif}}(\theta) = \int_{\mathcal{D}} \tilde{\mathcal{G}}(\theta, \mathbf{r}') w(\mathbf{r}') d\mathbf{r}'. \quad (9)$$

A forward solver, whose role is to solve the direct problem which consists in computing E^{dif} , χ and E^{inc} being known, first solve Equation (8) for w and then Equation (9) for E^{dif} . This is done from discrete counterparts of these equations obtained by applying a moment method with pulse basis functions and point matching [32], which results in partitioning the object domain into $N_{\mathcal{D}}$ elementary square pixels small enough in order to consider the permittivity and the total field as constant over each of them. This leads to the two following linear systems:

$$w(\mathbf{r}_i) = \chi(\mathbf{r}_i)E^{\text{inc}}(\mathbf{r}_i) + \chi(\mathbf{r}_i) \sum_{j=1}^{N_{\mathcal{D}}} \mathcal{H}_{ij}^{\mathcal{D}} w(\mathbf{r}_j), \quad i = 1, \dots, N_{\mathcal{D}}, \quad (10)$$

$$E^{\text{dif}}(\theta_n) = \sum_{j=1}^{N_{\mathcal{D}}} \mathcal{H}_{nj}^{\mathcal{S}} w(\mathbf{r}_j), \quad n = 1, \dots, N_r, \quad (11)$$

where the elements $\mathcal{H}_{ij}^{\mathcal{D}}$ and $\mathcal{H}_{nj}^{\mathcal{S}}$ result from the integration over the elementary square pixels of Green's functions \mathcal{G} and $\tilde{\mathcal{G}}$, respectively. The computation of the latter does not pose any problem as \mathcal{G} is known in the spatial domain and, hence a closed form expression of $\mathcal{H}_{nj}^{\mathcal{S}}$ is easily obtained. On the contrary

\mathcal{G} is known in the spectral domain; it is, therefore, judicious to solve Equation (10) by means of a method such as the Conjugate Gradient Fast Fourier Transform method (CG-FFT [33]) which allows one to save time as it preserves the convolutional/correlational nature of the equation. Details on such computations, in a configuration similar to that considered herein, can be found in [30]. Figure 2 displays the results obtained in this way with the object depicted in Figure 1 for two illumination angles. The object domain is partitioned into $N_{\mathcal{D}} = 512 \times 327.3$ nm-sided square pixels. Generally, the scattered fields are well described except in directions close to the specular reflection where the data are very noisy. This can be explained by the fact that the scattered field is negligible as compared to the incident field and, hence is hard to be accurately determined in these directions. For the same reason, data are missing in the vicinity of the specular direction.

4. The Bayesian approach

Let us introduce two vectors, ϵ and ξ , that take into account all the errors: measurement uncertainties and model errors (discretization and other approximations). By accounting for these errors and for the different views v ($v = 1, \dots, N_v$), the discrete version of the forward model (Equations (10) and (11)) reads in an operator notation:

$$E_v^{\text{dif}} = \mathcal{H}^{\mathcal{S}} w_v + \epsilon_v, \quad (12)$$

$$w_v = \chi E_v^{\text{inc}} + \chi \mathcal{H}^{\mathcal{D}} w_v + \xi_v. \quad (13)$$

E_v^{dif} , E_v^{inc} and w_v are complex vectors that contain the scattered field data, the incident fields and the induced sources corresponding to the different views, χ is a real vector that contains the values of the contrast at the centers of the pixels and $\mathcal{H}^{\mathcal{S}}$ and $\mathcal{H}^{\mathcal{D}}$ are operators which act from $L^2(\mathcal{D})$ onto $L^2(\mathcal{S})$ and from $L^2(\mathcal{D})$ onto itself and are represented by matrices whose elements are $\mathcal{H}_{nj}^{\mathcal{S}}$ and $\mathcal{H}_{ij}^{\mathcal{D}}$, respectively. The goal is now to estimate both the contrast χ and the induced sources w_v from the scattered field data E_v^{dif} .

In order to introduce the Bayesian approach used herein, let us first consider only Equation (12). In a classical statistical estimation approach (in the sense of the *maximum likelihood estimation*), a probability distribution $p_{\epsilon}(\epsilon)$ is defined on ϵ and, then, the unknown variable w that maximizes the likelihood $p(E^{\text{dif}}|w) = p_{\epsilon}(E^{\text{dif}} - \mathcal{H}^{\mathcal{S}} w)$ is computed. The Bayesian approach [22] takes a different way; it allows including any a priori information available on the sought unknown through a prior probability law $p(w)$.

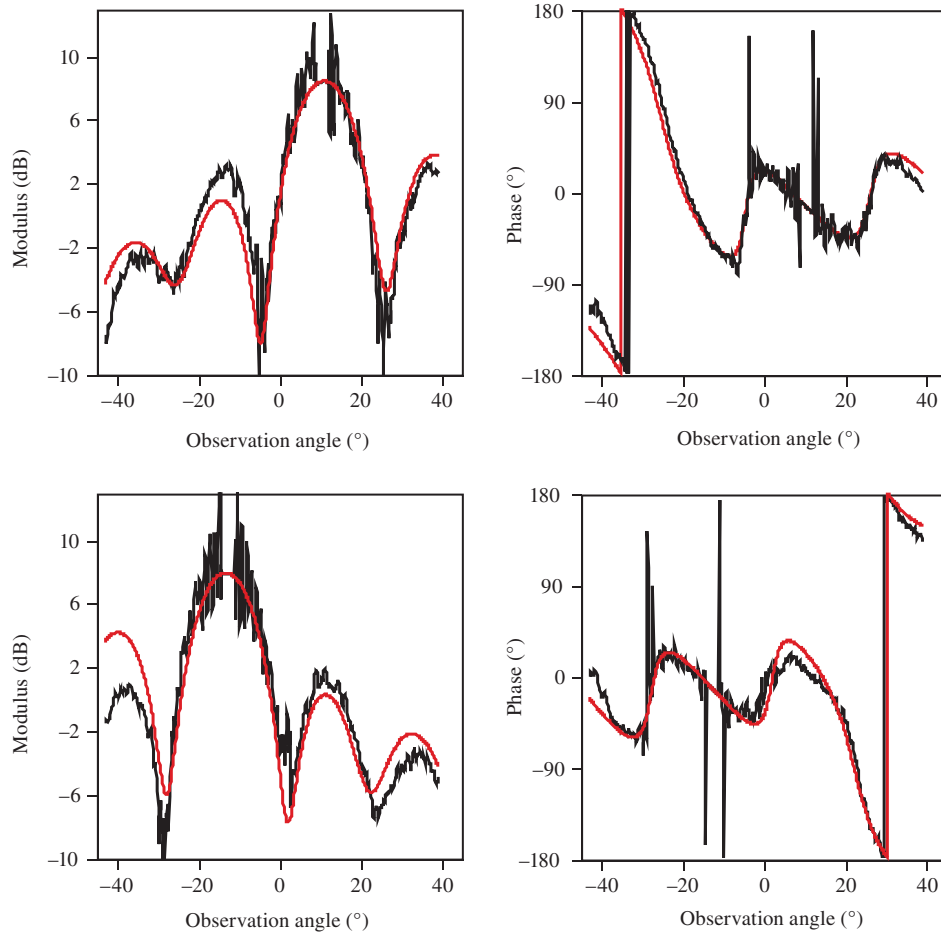


Figure 2. Modulus (left) and phase (right) of the computed (—) and measured (—) scattered fields for two different illumination angles: $\theta = 10.53^\circ$ (up) and $\theta = -12.67^\circ$ (down). (The color version of this figure is included in the online version of the journal.)

Then, using the Bayes formula:

$$p(\mathbf{w}|E^{\text{dif}}) = \frac{p(E^{\text{dif}}|\mathbf{w})p(\mathbf{w})}{p(E^{\text{dif}})}, \quad (14)$$

we get a posterior distribution of \mathbf{w} from which an estimate $\hat{\mathbf{w}}$ can be inferred. An example of such an estimate is the *maximum a posteriori* (MAP):

$$\begin{aligned} \hat{\mathbf{w}} &= \arg \max_{\mathbf{w}} \{p(\mathbf{w}|E^{\text{dif}})\} \\ &= \arg \min_{\mathbf{w}} \{-\ln(p(E^{\text{dif}}|\mathbf{w})) - \ln(p(\mathbf{w}))\}, \end{aligned} \quad (15)$$

which makes a simple link between the Bayesian approach and the regularization theory which takes into account both the data misfit and the a priori information. But other estimates can be chosen, such as the *posterior mean* (PM) which is used herein and

approximated by means of a *Gibbs sampling algorithm* [26].

In the following, first the expression of the likelihood $p(E^{\text{dif}}|\mathbf{w})$ is given. Then, the proposed hierarchical prior model is detailed: the particular choice of the a priori $p(\mathbf{w})$ is commented on as well as the way in which the coupling Equation (13) is accounted for. Finally, we look for the joint posterior law of all the unknown (\mathbf{w}, χ) from which a solution is obtained.

4.1. Noise modeling and likelihood

In general, the only knowledge available on the error ϵ_v is that it must be centered, white and with a fixed variance ρ_ϵ^2 . This prior information on ϵ_v can then be modeled through the probability law $p(\epsilon_v) = \mathcal{N}(0, \rho_\epsilon^2 \mathbf{I})$, where \mathbf{I} is the identity matrix. $p(\epsilon_v)$ being known, the expression of the likelihood is easily derived from

observation Equation (12):

$$\begin{aligned} p(\mathbf{E}^{\text{dif}}|\mathbf{w}) &= \prod_v p(\mathbf{E}_v^{\text{dif}}|\mathbf{w}_v) = \prod_v \mathcal{N}(\mathcal{H}^S \mathbf{w}_v, \rho_\epsilon^2 \mathbf{I}) \\ &= \prod_v \left(\frac{1}{2\pi\rho_\epsilon^2} \right)^{N_r/2} \exp\left(-\frac{1}{2\rho_\epsilon^2} \|\mathbf{E}_v^{\text{dif}} - \mathcal{H}^S \mathbf{w}_v\|_S^2 \right), \end{aligned} \quad (16)$$

where $\|\cdot\|_S$ represents the norm associated with the inner product $\langle \cdot, \cdot \rangle_S$ in $L^2(\mathcal{S})$.

4.2. Hierarchical prior modeling

In the Bayesian approach, the most important point is to choose an appropriate probability law for the unknowns. Hence let us now define a prior probability law for the variables \mathbf{w}_v . The only a priori information that is taken into account in order to set the prior distribution of the sources \mathbf{w}_v is their relation to the contrast χ given by the state Equation (13). Hence, if we assume a white noise ξ_v satisfying a Gaussian law with zero mean and covariance matrix $\rho_\xi^2 \mathbf{I}$ (i.e. of law $p(\xi_v) = \mathcal{N}(0, \rho_\xi^2 \mathbf{I})$), then the prior distribution reads:

$$p(\mathbf{w}_v|\chi) \propto \exp\left(-\frac{1}{2\rho_\xi^2} \|\mathbf{w}_v - \chi \mathbf{E}_v^{\text{inc}} - \chi \mathcal{H}^D \mathbf{w}_v\|_D^2 \right). \quad (17)$$

The parameter ρ_ξ^2 is assumed to satisfy $\rho_\xi^2 = \gamma \rho_\epsilon^2$, where γ has a fixed value. This allows us to make a connection between our Bayesian method and the *contrast source inversion method* (see Section 4.4).

As for the contrast, the object under test is known to be composed of compact homogeneous regions made of a finite number N_κ ($N_\kappa=2$) of different materials. Let $\mathbf{z}(\mathbf{r})$ ($\mathbf{z}(\mathbf{r}) \in \{1, \dots, N_\kappa\}$) be the classification label of a pixel located at \mathbf{r} ($\mathbf{r} \in \mathcal{D}$) and by $\mathbf{z} = \{z(1), \dots, z(N_D)\}$ the set of labels corresponding to the whole set of pixels that partition the test domain \mathcal{D} . Then, the a priori information that the object is composed of a restricted number of homogeneous materials can be accounted for through the following conditional distribution:

$$p(\chi(\mathbf{r})|\mathbf{z}(\mathbf{r}) = \kappa) = \mathcal{N}(m_\kappa, \rho_\kappa^2). \quad (18)$$

This means that all the pixels with the same label ($\mathbf{z}(\mathbf{r}) = \kappa$) correspond to the same material for which $\chi(\mathbf{r})$ has a mean value m_κ and a variance ρ_κ^2 .

It can be noted that the values $\chi(\mathbf{r})$ of the contrast, given \mathbf{z} , will be considered as spatially independent. Indeed, the spatial dependence between the pixels of the image will be taken into account through the hidden variable \mathbf{z} .

A second important a priori information on the object is that it is made of compact homogeneous

regions. This information can be accounted for by relating, in a probabilistic way, the classification label $\mathbf{z}(\mathbf{r})$ of a pixel \mathbf{r} to that of its neighbors.

This can be done by means of a *Potts–Markov random field*:

$$p(\mathbf{z}(\mathbf{r})|\mathbf{z}(\mathbf{r}')) \propto \exp\left(\frac{\Upsilon}{2} \sum_{\mathbf{r}' \in \mathcal{V}(\mathbf{r})} \delta[\mathbf{z}(\mathbf{r}) - \mathbf{z}(\mathbf{r}')] \right), \quad (19)$$

where Υ determines the correlation between neighbors (herein $\Upsilon=2$), $\delta(0)=1$ and $\delta(t)=0$ if $t \neq 0$. $\mathcal{V}(\mathbf{r})$ is the neighborhood of \mathbf{r} , herein made of the four nearest pixels. Then the probability law for the classification follows:

$$p(\mathbf{z}) = \frac{1}{\Xi} \exp\left(\frac{\Upsilon}{2} \sum_{\mathbf{r} \in \mathcal{D}} \sum_{\mathbf{r}' \in \mathcal{V}(\mathbf{r})} \delta[\mathbf{z}(\mathbf{r}) - \mathbf{z}(\mathbf{r}')] \right), \quad (20)$$

where Ξ is a normalization constant.

Therefore, the classification \mathbf{z} being known, we can assign to each pixel $\chi(\mathbf{r})$ ($\chi \in \mathbb{R}^{N_D}$) mean values m_κ and variances ρ_κ^2 gathered in a vector $\mathbf{m}_z \in \mathbb{R}^{N_D}$ and a matrix $\Sigma_z \in \mathcal{M}^{N_D}(\mathbb{R})$, respectively:

$$\begin{aligned} \mathbf{m}_z &= \{m_{z(\mathbf{r}_i)}, i = 1, 2, \dots, N_D\}, \\ \Sigma_z &= \text{diag}\{\rho_{z(\mathbf{r}_i)}^2, i = 1, 2, \dots, N_D\}. \end{aligned} \quad (21)$$

Then, χ satisfies a multivariate Gaussian distribution and the hidden Markov model (HMM) follows:

$$p_{\text{HMM}}(\chi|\mathbf{z}) = \mathcal{N}(\mathbf{m}_z, \Sigma_z) \propto \exp\left[-\frac{1}{2} V_z(\chi) \right], \quad (22)$$

with:

$$V_z(\chi) = (\chi - \mathbf{m}_z)^T \Sigma_z^{-1} (\chi - \mathbf{m}_z), \quad (23)$$

where superscript ‘T’ denotes the transposition. As we also know that the contrast is positive, we use a truncated hidden Markov model (THMM) where the distribution of χ is:

$$p(\chi|\mathbf{z}) = p_{\text{HMM}}(\chi|\mathbf{z}) \mathbb{1}_{\chi \geq 0}, \quad (24)$$

$\mathbb{1}_{\chi \geq 0}$ means the restriction to positive $\chi(\mathbf{r})$.

From now on, the various parameters that appear in the probability distributions defined above, such as ρ_ϵ^2 , ρ_ξ^2 , \mathbf{m}_κ and Σ_κ , will be denoted as the *hyper-parameters* and gathered in the vector ψ ($\psi = \{\rho_\epsilon^2, \rho_\xi^2, (\mathbf{m}_\kappa, \Sigma_\kappa)\}$ with $\kappa=1, \dots, N_\kappa$). In a non-supervised method, such as the one adopted herein, these hyper-parameters have also to be estimated and prior laws must then be assigned to them. These prior distributions account for the a priori information on their values; in particular, the prior distributions of \mathbf{m}_κ and Σ_κ account for the a priori information on the different materials that compose the object. Herein, the prior distributions have been

chosen as the conjugate priors [34]:

- Inverse Gamma (\mathcal{IG}) for the different variances:

$$\begin{aligned} p(\rho_\epsilon^2) &= \mathcal{IG}(\eta_\epsilon, \phi_\epsilon), \\ p(\rho_\xi^2) &= \mathcal{IG}(\eta_\xi, \phi_\xi), \quad p(\rho_\kappa^2) = \mathcal{IG}(\eta_\kappa, \phi_\kappa), \end{aligned} \quad (25)$$

where

$$\mathcal{IG}(\eta, \phi) \propto \left[\left(\frac{1}{\rho^2} \right)^{(\eta+1)} \exp\left(-\frac{\phi}{\rho^2}\right) \right].$$

- Gaussian for the different means [35]:

$$p(m_\kappa) = \mathcal{N}(\mu_\kappa, \tau_\kappa). \quad (26)$$

These conjugate priors depend also upon various parameters (η, ϕ, μ, τ) , denoted as *meta-hyper-parameters*, that are set to have non-informative priors, i.e. flat prior distributions.

4.3. Posterior laws

Now we have all the ingredients necessary to find the expression of the joint posterior law of all the unknowns $(\chi, \mathbf{w}, \mathbf{z}, \psi)$:

$$p(\chi, \mathbf{w}, \mathbf{z}, \psi | E^{\text{dif}}) \propto p(E^{\text{dif}} | \mathbf{w}) p(\mathbf{w} | \chi) p(\chi | \mathbf{z}) p(\mathbf{z}) p(\psi). \quad (27)$$

Since no tractable estimator (MAP or PM) of these unknowns is available for this posterior law, we have to approximate it numerically. This is done by means of a Monte Carlo Markov Chain (MCMC [26]) sampling method, where the samples are drawn according to the conditional posterior law, which corresponds to a Gibbs sampling algorithm. Hence, the conditional a posteriori distributions $p(\chi | E^{\text{dif}}, \mathbf{w}, \mathbf{z}, \psi)$, $p(\mathbf{w} | E^{\text{dif}}, \chi, \mathbf{z}, \psi)$, $p(\mathbf{z} | E^{\text{dif}}, \chi, \mathbf{w}, \psi)$, $p(\mathbf{m}_\kappa | \Sigma_\kappa | E^{\text{dif}}, \chi, \mathbf{w}, \mathbf{z})$ and $p(\rho_\epsilon^2 | E^{\text{dif}}, \chi, \mathbf{w}, \mathbf{z})$ have to be determined. The choice of conjugate priors for the hyper-parameters allows us to sample easily the posterior laws $p(\mathbf{m}_\kappa | E^{\text{dif}}, \chi, \mathbf{w}, \mathbf{z})$, $p(\Sigma_\kappa | E^{\text{dif}}, \chi, \mathbf{w}, \mathbf{z})$ and $p(\rho_\epsilon^2 | E^{\text{dif}}, \chi, \mathbf{w}, \mathbf{z})$, as the latter stay in the same family, i.e. Gaussian for the means and inverse gamma for the variances.

Hence, with the following notation:

$$\begin{aligned} R_\kappa &= \{\mathbf{r}; z(\mathbf{r}) = \kappa\}, \quad n_\kappa = \text{card}(R_\kappa), \\ \bar{\chi}_\kappa &= \frac{1}{n_\kappa} \sum_{\mathbf{r} \in R_\kappa} \chi(\mathbf{r}), \quad s_\kappa^2 = \frac{1}{n_\kappa} \sum_{\mathbf{r} \in R_\kappa} (\chi(\mathbf{r}) - \bar{\chi}_\kappa)^2, \end{aligned}$$

these distributions read:

$$\begin{aligned} & \bullet \\ p(\rho_\epsilon^2 | E^{\text{dif}}, \chi, \mathbf{w}, \mathbf{z}) & \\ & \propto p(E^{\text{dif}} | \chi, \mathbf{w}, \rho_\epsilon^2) p(\mathbf{w} | \chi, \rho_\epsilon^2) p(\rho_\epsilon^2) \\ & \propto p(\rho_\epsilon^2) \prod_v p(E_v^{\text{dif}} | \chi, \mathbf{w}_v, \rho_\epsilon^2) p(\mathbf{w}_v | \chi, \rho_\epsilon^2) = \mathcal{IG}(\eta_\epsilon, \phi_\epsilon), \end{aligned} \quad (28)$$

with:

$$\begin{aligned} \eta_\epsilon &= \eta_\epsilon^0 + N_v(N_r + N_D), \\ \phi_\epsilon &= \phi_\epsilon^0 + \frac{\sum_v \|E_v^{\text{dif}} - \mathcal{H}^S \mathbf{w}_v\|_S^2}{2} \\ & \quad + \frac{\sum_v \|\chi E_v^{\text{inc}} - \mathbf{w}_v + \chi \mathcal{H}^D \mathbf{w}_v\|_D^2}{2\gamma}. \end{aligned}$$

•

$$p(\Sigma_\kappa | E^{\text{dif}}, \chi, \mathbf{w}, \mathbf{z}) = p(\rho_\kappa^2 | E^{\text{dif}}, \chi, \mathbf{w}, \mathbf{z}) = \mathcal{IG}(\eta_\kappa, \phi_\kappa), \quad (29)$$

where:

$$\eta_\kappa = \eta_\kappa^0 + \frac{n_\kappa}{2}, \quad \phi_\kappa = \phi_\kappa^0 + \frac{1}{2} n_\kappa s_\kappa^2 + \frac{1}{2} \frac{n_\kappa}{\tau n_\kappa + 1} (\bar{\chi}_\kappa - \mu_\kappa^0)^2;$$

•

$$\begin{aligned} p(\mathbf{m}_\kappa | E^{\text{dif}}, \chi, \mathbf{w}, \mathbf{z}, \Sigma_\kappa) & \\ & = p(\mathbf{m}_\kappa | \rho_\kappa^2, E^{\text{dif}}, \chi, \mathbf{w}, \mathbf{z}) = \mathcal{N}(\mu_\kappa, \Sigma_\kappa), \end{aligned} \quad (30)$$

with:

$$\mu_\kappa = \frac{n_\kappa \bar{\chi}_\kappa + \mu_\kappa^0 / \tau}{n_\kappa + 1/\tau}, \quad \Sigma_\kappa = \frac{\rho_\kappa^2}{n_\kappa + 1/\tau}.$$

The posterior distribution of the classification $p(\mathbf{z} | E^{\text{dif}}, \chi, \mathbf{w}, \psi)$ is a Markov field with the same neighborhood as previously (four pixels); the sampling of this distribution can be done by means of a two step procedure (see [35,36]). First, the set of pixels is decomposed like a chessboard. Let \mathbf{z}_w and \mathbf{z}_b be the sets of white and black pixels, respectively. Let us note, then, that the four neighbors of each white pixel are black and vice versa. Hence, knowing the black pixels \mathbf{z}_b , all the white pixels \mathbf{z}_w are independent and can be drawn simultaneously and vice versa. Sampling of $p(\mathbf{z} | E^{\text{dif}}, \chi, \mathbf{w}, \psi)$ is then performed with a Gibbs sampling algorithm, by alternating the drawing of \mathbf{z}_w knowing \mathbf{z}_b and of \mathbf{z}_b knowing \mathbf{z}_w .

As for \mathbf{w}_v , its a posteriori distribution reads as follows:

$$\begin{aligned} p(\mathbf{w}_v | E_v^{\text{dif}}, \chi, \mathbf{z}, \psi) & \\ & \propto p(E_v^{\text{dif}} | \mathbf{w}_v, \rho_\epsilon^2) p(\mathbf{w}_v | \chi, \rho_\epsilon^2) \propto \exp\left[-\frac{J_v(\mathbf{w}_v)}{2\rho_\epsilon^2}\right], \end{aligned} \quad (31)$$

with:

$$J_v(\mathbf{w}_v) = \|E_v^{\text{dif}} - \mathcal{H}^S \mathbf{w}_v\|_S^2 + \frac{1}{\gamma} \|\chi E_v^{\text{inc}} - \mathbf{w}_v + \chi \mathcal{H}^D \mathbf{w}_v\|_D^2. \quad (32)$$

Hence, the a posteriori distribution of \mathbf{w}_v is Gaussian. The sampling of this distribution requires the computation of its mean and covariance matrix, which requires, in turn, to get the inverse of a

high-dimension matrix. Therefore, to avoid this we approximate a sample of this distribution by the one which is the most probable. This comes down to minimizing the criterion J_v (see (32)).

By using the same method, we can obtain the posterior distribution $p(\chi|E^{\text{dif}}, \mathbf{w}, \mathbf{z}, \psi)$, but this posterior law is no longer Gaussian. However, it can reasonably be approximated by a truncated Gaussian distribution which reads:

$$p(\chi|E^{\text{dif}}, \mathbf{w}, \mathbf{z}, \psi) \propto \exp \left[-\frac{\sum_v \|\chi E_v - \mathbf{w}_v\|_{\mathcal{D}}^2}{2\gamma\rho_\epsilon^2} - \frac{V_z(\chi)}{2} \right] \mathbb{1}_{\chi \geq 0}, \quad (33)$$

where $E_v = E_v^{\text{inc}} + \mathcal{H}^D \mathbf{w}_v$ and V_z is given in (23).

4.4. Connection with the contrast source inversion method

The method developed herein can be seen as a Bayesian interpretation of the *Contrast Source Inversion method* (CSI) [12], a method developed in a deterministic framework which consists of minimizing the cost functional:

$$J_{\text{CSI}}(\chi, \mathbf{w}) = \frac{\sum_v \|E_v^{\text{dif}} - \mathcal{H}^S \mathbf{w}_v\|_{\mathcal{S}}^2}{\sum_v \|E_v^{\text{dif}}\|_{\mathcal{S}}^2} + \frac{\sum_v \|\chi E_v^{\text{inc}} - \mathbf{w}_v + \chi \mathcal{H}^D \mathbf{w}_v\|_{\mathcal{D}}^2}{\sum_v \|\chi E_v^{\text{inc}}\|_{\mathcal{D}}^2} \quad (34)$$

by alternately updating \mathbf{w} and χ with a gradient-based method. The role of parameter γ (such that $\rho_\epsilon^2 = \gamma\rho_\epsilon^2$) can then be understood in the following way: if we choose a uniform prior law for $p(\chi)$ instead of the THMM, then maximizing the resulting a posteriori distribution $p(\chi, \mathbf{w}|E^{\text{dif}})$ comes down to minimizing J_{CSI} when:

$$\gamma = \frac{\sum_v \|E_v^{\text{dif}}\|_{\mathcal{S}}^2}{\sum_v \|\chi E_v^{\text{inc}}\|_{\mathcal{D}}^2}. \quad (35)$$

So, the contrast estimated by CSI can be seen as the maximum likelihood estimate without prior information. Conversely, the MAP with a different a priori law for $p(\chi)$ (such as THMM) comes down to the minimization of a regularized criterion.

Let us note that, in the following, the parameter γ is updated at each iteration according to Equation (35).

4.5. The reconstruction algorithm

Finally, the proposed reconstruction algorithm can be summarized as follows. Given the contrast $\chi^{(n-1)}$, the sources $\mathbf{w}^{(n-1)}$ and the hyper-parameters $\psi^{(n-1)}$ at

iteration step $(n-1)$:

- (1) sample $\hat{\mathbf{z}}^{(n)}$ according to $p(\mathbf{z}|E^{\text{dif}}, \hat{\chi}^{(n-1)}, \hat{\psi}^{(n-1)})$ – see Section 4.3,
- (2) sample $\hat{\rho}_\epsilon^{(n)}$ according to $p(\rho_\epsilon^2|E, \hat{\chi}^{(n-1)}, \hat{\mathbf{w}}^{(n-1)}, \hat{\mathbf{z}}^{(n)})$ – see (28),
- (3) sample $(\hat{\mathbf{m}}_k, \hat{\Sigma}_k)$ according to $p(\mathbf{m}_k, \Sigma_k|\hat{\chi}^{(n-1)}, \hat{\mathbf{z}}^{(n)})$ – see (29)–(30),
- (4) sample $\hat{\mathbf{w}}^{(n)}$ according to $p(\mathbf{w}|E^{\text{dif}}, \hat{\chi}^{(n-1)}, \hat{\mathbf{z}}^{(n)}, \hat{\psi}^{(n)})$ – see (31), which can be done through the minimization of J_v – see (32),
- (5) sample $\hat{\chi}^{(n)}$ according to $p(\chi|E^{\text{dif}}, \hat{\mathbf{w}}^{(n)}, \hat{\mathbf{z}}^{(n)}, \hat{\psi}^{(n)})$ – see (33).

Theoretically steps 1 to 5 have to be iterated a great number of times, first without keeping track of the samples until a convergence level is reached (the heating time of the Gibbs sampler) and then while keeping track in order to compute the means and variances of the samples. However, in practice, it has been observed that all the variables do not significantly evolve after about 250 iterations. This is true, in particular, for the hyper-parameters that keep quite the same value with a small variance, as illustrated in Figure 3, which displays the evolution of some of the latter as functions of the iteration step. Hence, the maximum number of iterations has been set at 512 and the posterior mean is estimated by taking the mean of the last 100 samples, which appears to be sufficient in our case.

4.6. Initialization

The variables \mathbf{w} and χ are initialized as follows: the initial estimate of the sources is obtained by back-propagating the scattered field data from \mathcal{S} onto \mathcal{D} [37]:

$$\mathbf{w}_v^{(0)} = \Gamma \mathcal{H}^{S*} E_v^{\text{dif}}, \quad (36)$$

where \mathcal{H}^{S*} is the operator adjoint to \mathcal{H}^S that acts from $L^2(\mathcal{S})$ onto $L^2(\mathcal{D})$ and such that:

$$\langle \mathbf{w}_v, \mathcal{H}^{S*} E_v^{\text{dif}} \rangle_{\mathcal{D}} = \langle \mathcal{H}^S \mathbf{w}_v, E_v^{\text{dif}} \rangle_{\mathcal{S}},$$

and Γ is a constant which is obtained by minimizing $\sum_v \|E_v^{\text{dif}} - \Gamma \mathcal{H}^S \mathcal{H}^{S*} E_v^{\text{dif}}\|_{\mathcal{S}}^2$.

The field $E_v^{(0)}$ follows immediately via the coupling equation:

$$E_v^{(0)} = E_v^{\text{inc}} + \mathcal{H}^D \mathbf{w}_v^{(0)}, \quad (37)$$

and $\chi^{(0)}$ is then obtained by minimizing the criterion:

$$\sum_v [\|\chi E_v^{(0)} - \mathbf{w}_v^{(0)}\|_{\mathcal{D}}^2 + \sigma_v \|\chi\|_{\mathcal{D}}^2], \quad (38)$$

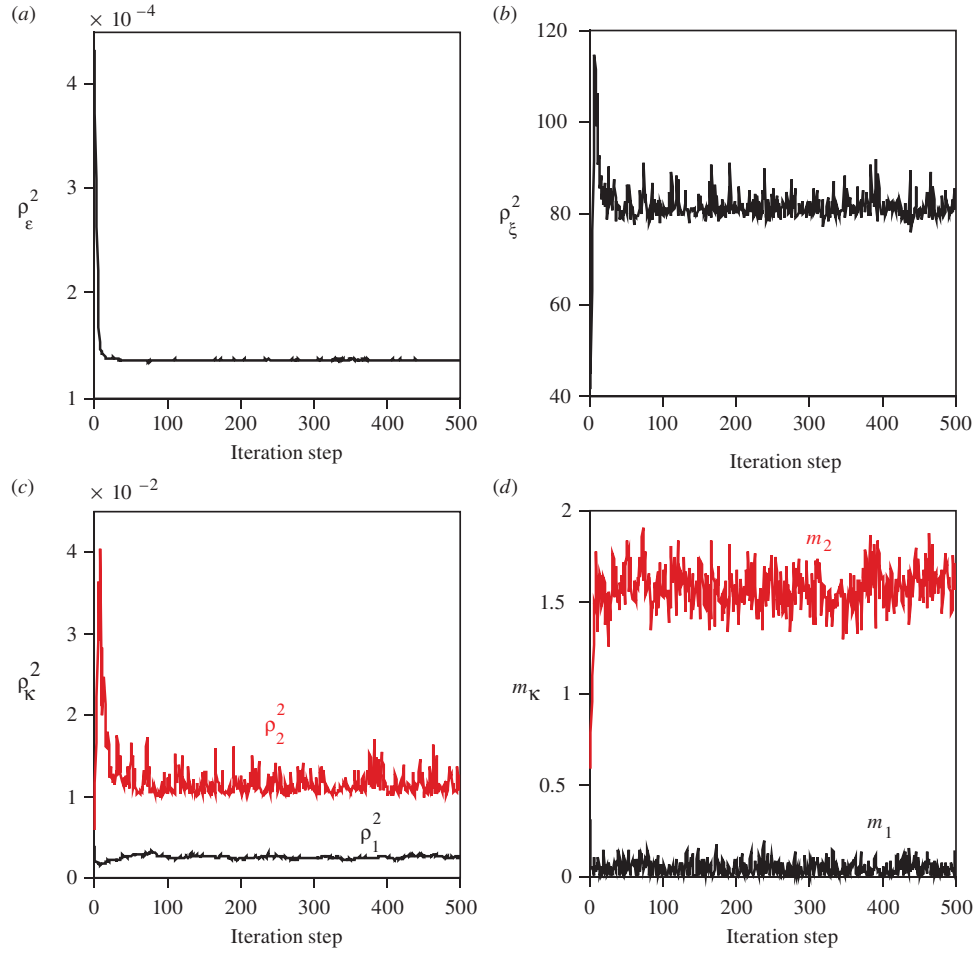


Figure 3. The behavior of some of the hyper-parameters during the iterative process: the variances ρ_ϵ^2 (a) and ρ_ξ^2 (b) and the variances ρ_κ^2 (c) and the means m_κ (d) of the contrast for classes $\kappa=1$ (air) and $\kappa=2$ (resin). (The color version of this figure is included in the online version of the journal.)

where σ_v is a constant arbitrarily set to $\sigma_v = 0.1|E_v^{\text{inc}}|$. It can be noted that the presence of the regularizing term $\sigma_v \|\chi\|^2$ in the criterion to be minimized is made necessary as arbitrarily small values of $E_v^{(0)}$ can be obtained near the γ_{12} interface, which leads to exploding initial values for the contrast. By accounting for the fact that the contrast is positive, we get:

$$\chi^{(0)} = \frac{\sum_v \left(\Re e(w_v^{(0)} \bar{E}_v^{(0)}) \right)}{\sum_v (|E_v^{(0)}|^2 + \sigma_v)} \mathbb{1}_{\chi \geq 0}, \quad (39)$$

which means that $\chi^{(0)}$ is set to 0 if the above value is negative.

From $w^{(0)}$ (Equation (36)) and $\chi^{(0)}$ (Equation (39)), the classification z and the hyper-parameters (means and variances) can be initialized by means of a segmentation method. A *K-means algorithm* [38] is used herein with an empirical estimator that allows us to estimate the different classes and their centers in such a way that their variances are minimum.

5. Results

Figure 4 displays the classification, the contrast and the profile of the contrast (retrieved along the y axis at a height $x=0.1 \mu\text{m}$) obtained with the above algorithm after 512 iteration steps. The algorithm succeeds in retrieving homogeneous regions that correspond to the two resin rods with accurate values of the contrast and description of the geometries. Indeed, although the real and retrieved contours are a little bit different, the real and retrieved cross-sections are of about the same surface. These results are compared to those obtained by means of a modified version of the contrast source inversion method after 100 iteration steps and it can be observed that the latter are much less accurate than the former, although they are of a quality comparable to that of the results displayed in [27] which have been obtained by means of a *modified gradient method*. This approach is similar to the contrast source inversion method except that, at each iteration step, with the former approach the contrast and the total field within

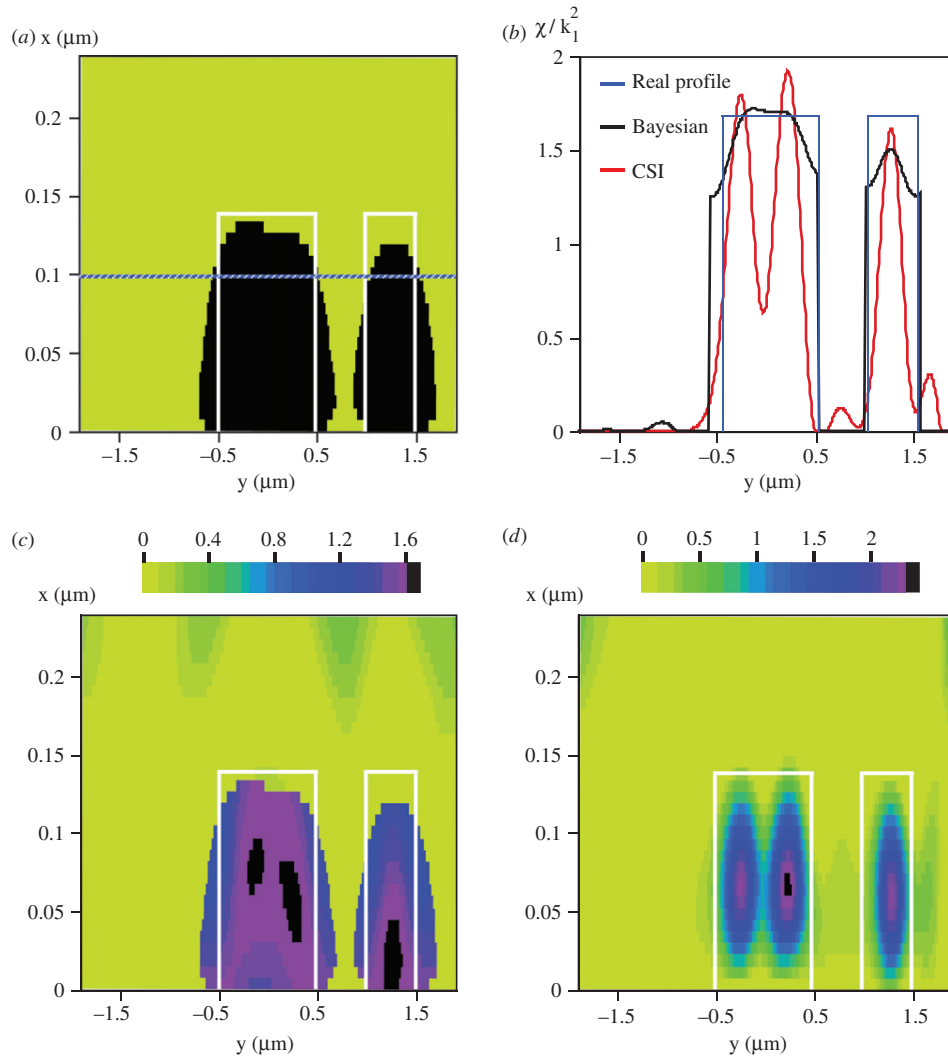


Figure 4. The class (a), the normalized contrast profile retrieved at a height $x = 0.1 \mu\text{m}$ (b) and the normalized contrast (χ/k_1^2) retrieved by means of the proposed Bayesian approach (c) and the contrast source inversion method (d) after 100 iteration steps. The true profile is indicated by white lines. The test domain is a $3.8 \mu\text{m} \times 0.237 \mu\text{m}$ -sided rectangle divided into 512×32 square pixels with a side of 7.4 nm . (The color version of this figure is included in the online version of the journal.)

the test domain are simultaneously updated whereas, with the latter approach, the contrast and the induced sources are alternately updated. Let us note that herein, for the same reason as in Section 4.6, the criterion (34) must be modified, the right-hand side term with respect to the $+$ sign being then replaced by criterion (38).

6. Conclusion

We consider optical imaging as an inverse obstacle scattering problem which is known to be ill-posed. This means that a regularization of the problem is required prior to its resolution, and this regularization generally

consists of introducing a priori information on the sought solution. Herein, such information is all the more necessary since aspect-limited data are considered which enhance the ill-posedness of the inverse problem. The latter come from a laboratory controlled experiment led at the Institut Fresnel. They concern man-made objects that are known to be composed of a finite number of different materials, which constitutes an important prior knowledge. This means that the sought image is composed of a finite number of homogeneous regions. This prior knowledge is accounted for by means of a Gauss–Markov–Potts prior modeling of the contrast distribution developed in the Bayesian estimation framework.

The object studied herein is also known to be of high dielectric contrast which prevent us from using a Born-based linearized version of the inverse problem. So the latter is nonlinear and is derived from two coupled integral equations that link the measured scattered fields to the contrast sources induced within the object, both the contrast sources and the contrast being then considered as unknowns.

Good results have been obtained concerning the retrieved values of the contrast and the geometry of the object and it has been shown that the Bayesian approach developed herein performs better than deterministic iterative techniques such as the contrast source inversion and modified gradient methods.

Finally, the major drawback of the method is that it is time consuming, i.e. about one hour is needed for 512 iteration steps in the configuration considered herein on a dual core 2.66 GHz processor machine. At the present time, another approximation method, the so-called *variational Bayesian approach*, is under study. It allows a faster approximation of the posterior laws than the MCMC sampling method, while keeping small the approximation error. However, it can be mentioned that the major part (70%) of the cost is due to the incompressible computation of direct and adjoint operators. So, time can be saved on the remaining 30% and also on the number of iteration steps needed to reach convergence which is supposed to be lower than that of the MCMC sampling method.

Acknowledgements

The experimental data used herein are courtesy of G. Maire, A. Sentenac and K. Belkebir (Institut Fresnel, Marseille, France). The authors would also like to acknowledge the invitation of the latter two who contributed to this special issue.

References

- [1] Lauer, V. *J. Microsc.* **2002**, 205, 165–176.
- [2] Mueller, R.K.; Kaveh, M.; Wade, G. *Proc. IEEE* **1979**, 67, 567–587.
- [3] Devaney, A.J. *IEEE Trans. Biomed. Eng.* **1983**, BME-30, 377–386.
- [4] Pichot, C.; Jofre, L.; Perronnet, G.; Bolomey, J. *IEEE Trans. Antennas Propagat.* **1985**, AP-33, 416–425.
- [5] Tabbara, W.; Duchêne, B.; Pichot, C.; Lesselier, D.; Chommeloux, L.; Joachimowicz, N. *Inverse Prob.* **1988**, 4, 305–332.
- [6] Debailleul, M.; Simon, B.; Georges, V.; Haeberlé, O.; Lauer, V. *Meas. Sci. Technol.* **2008**, 19, 074009.
- [7] Simon, B.; Debailleul, M.; Georges, V.; Lauer, V.; Haeberlé, O. *Eur. Phys. J. Appl. Phys.* **2008**, 44, 29–35.
- [8] Azimi, M.; Kak, A. *IEEE Trans. Med. Imaging* **1983**, MI-2, 176–195.
- [9] Slaney, M.; Kak, A.; Larsen, L. *IEEE Trans. Microwave Theory Tech.* **1984**, MTT-32, 860–874.
- [10] Souriau, L.; Duchêne, B.; Lesselier, D.; Kleinman, R.E. *Inverse Prob.* **1996**, 12, 463–481.
- [11] Kleinman, R.E.; van den Berg, P.M. *J. Comput. Appl. Math.* **1992**, 42, 17–35.
- [12] van den Berg, P.M.; Kleinman, R.E. *Inverse Prob.* **1997**, 13, 1607–1620.
- [13] van den Berg, P.M.; Kleinman, R.E. *Inverse Prob.* **1995**, 11, L5–10.
- [14] van den Berg, P.M.; van Broekhoven, A.L.; Abubakar, A. *Inverse Prob.* **1999**, 15, 1325–1344.
- [15] Crocco, L.; Isernia, T. *Inverse Prob.* **2001**, 17, 1573–1583.
- [16] Abubakar, A.; van den Berg, P.M. *Inverse Prob.* **2002**, 18, 495–510.
- [17] Charbonnier, P.; Blanc-Féraud, L.; Aubert, G.; Barlaud, M. *IEEE Trans. Image Process.* **1997**, IP-6, 298–311.
- [18] Belkebir, K.; Sentenac, A. *J. Opt. Soc. Am.* **2003**, 20, 1223–1229.
- [19] Tierney, L. *Ann. Stat.* **1994**, 22, 1701–1762.
- [20] Pieczynski, W. *Traitement du Signal* **2003**, 20, 255–278.
- [21] Féron, O.; Duchêne, B.; Mohammad-Djafari, A. *Inverse Prob.* **2005**, 21, S95–S115.
- [22] Idier, J. *Approche Bayésienne pour les Problèmes Inverses*; Hermès: Paris, 2001.
- [23] Féron, O.; Mohammad-Djafari, A. *J. Electronic Imaging* **2002**, 14, 1–12, ID: 023014.
- [24] Geman, S.; Geman, D. *IEEE Trans. Pattern Anal. Mach. Int.* **1984**, PAMI-6, 721–741.
- [25] Tierney, L.; Kadane, J.B. *J. Amer. Statist. Ass.* **1986**, 81, 82–86.
- [26] Robert, C.; Casella, G. *Monte Carlo Statistical Methods*; Springer Verlag: New York, 2004.
- [27] Maire, G.; Drsek, F.; Girard, J.; Giovannini, H.; Talneau, A.; Konan, D.; Belkebir, K.; Chaumet, P.C.; Sentenac, A. *Phys. Rev. Lett.* **2009**, 102, 213905.
- [28] Chew, W. *Waves and Fields in Inhomogeneous Media*; IEEE Press: New York, 1995.
- [29] Colton, D.; Kress, R. *Inverse Acoustic and Electromagnetic Scattering Theory*; Springer: New York, 1992.
- [30] Lesselier, D.; Buried, Duchêne B. 2-D Penetrable Objects Illuminated By Line-Sources: Fft-Based Iterative Computations Of The Anomalous Field. In *Application of Conjugate Gradient Methods to Electromagnetics and Signal Analysis*; Sarkar, T.K., Ed.; PIER, Elsevier: New York, 1991; Vol. 5, pp 400–438.
- [31] Clemmow, P.C. *The Plane Wave Spectrum Representation of Electromagnetic Fields*; Pergamon Press: Oxford, 1966.
- [32] Gibson, W.C. *The Method of Moments in Electromagnetics*; Chapman & Hall/CRC: Boca Raton, 2007.
- [33] Sarkar, T.K.; Arvas, E.; Rao, S.M. *IEEE Trans. Antennas Propag.* **1986**, AP-34, 635–640.
- [34] Bernardo, J.M.; Smith, A.F.M. *Bayesian Theory*; Wiley: Chichester, 1994.

- [35] Féron, O.; Chama, Z.; Mohammad-Djafari, A. Reconstruction of Piecewise Homogeneous Images from Partial Knowledge of their Fourier Transform. In *Maximum Entropy and Bayesian Method*: Erickson, G., Zhai, Y., Eds.; American Institute of Physics: Garching, 2004; pp 68–75.
- [36] Besag, J.E. *J. R. Stat. Soc. B* **1974**, *36*, 192–236.
- [37] Duchêne, B.; Joisel, A.; Lambert, M. *Inverse Prob.* **2004**, *20*, S81–98.
- [38] MacQueen, J. Some Methods for Classification and Analysis of Multivariate Observations. In *5th Berkeley Symposium on Mathematical Statistics and Probability*: Western Management Sciences Institute UCLA: Los Angeles, 1967; Vol. 1, pp 281–297.

Papier II

Optical diffraction tomography within a variational
Bayesian framework

RESEARCH ARTICLE

OPTICAL DIFFRACTION TOMOGRAPHY WITHIN A
VARIATIONAL BAYESIAN FRAMEWORK

H. Ayasso, B. Duchêne and A. Mohammad-Djafari

Laboratoire des Signaux et Systèmes (UMR 8506: CNRS - Supelec - Univ Paris-Sud 11),
Plateau de Moulon, 3 rue Joliot Curie, 91192 Gif-sur-Yvette, France.E-mail: Hacheme.Ayasso@lss.supelec.fr, Bernard.Duchene@lss.supelec.fr,
djafari@lss.supelec.fr

(Received 00 Month 200x; in final form 00 Month 200x)

Optical diffraction tomography techniques aim to find an image of an unknown object (e.g. a map of its refraction index) using measurements of the scattered field that results from its interaction with a known interrogating wave. We address this issue as a non-linear inverse scattering problem. The forward model is based upon domain integral representations of the electric field whose discrete counterparts are obtained by means of a method of moments. The inverse problem is tackled in a Bayesian estimation framework involving a hierarchical prior model that accounts for the piece-wise homogeneity of the object. A joint unsupervised estimation approach is adopted to estimate the induced currents, the contrast and all the other parameters introduced in the prior model. As an analytic expression for the joint *Maximum A Posteriori* (MAP) and *Posterior Mean* (PM) estimators is hard to obtain, a tractable approximation of the latter is proposed. This approximation is based upon a variational Bayesian technique and consists in the best separable distribution that approximates the true posterior distribution in the Kullback-Leibler sense. This leads to an implicit parametric optimization scheme which is solved iteratively.

Key Words: Optical Diffraction Tomography (ODT), Bayesian estimation, Hierarchical Markovian prior models, Variational Bayesian Approach (VBA).

INTRODUCTION

Since the beginning of the 1990s, *optical tomography* has received a great deal of attention, particularly in view of applications in medical imaging such as breast and brain imaging. As defined in [1], optical tomography means “the use of low-energy visible or near infra-red light to probe highly scattering media, in order to derive qualitative or quantitative images of the optical properties of these media”. Although it is rather large-fitting, this definition does not really cover all the fields of optical tomography as this name is also applied to some applications involving non- or lowly-scattering configurations. As underlined in the above-mentioned paper, this inverse problem can be handled in a large variety of different ways as the associated direct problem can be described as a particle or wave phenomenon and the models run from photon transport based upon the Boltzmann transport equation to wave scattering based upon the Helmholtz wave equation. Herein, we are concerned with the latter case, i.e. optical tomography is considered as an inverse scattering problem, which leads to the title: *Optical Diffraction Tomography* (ODT). Indeed, as defined in [2], *diffraction tomography* refers to “tomographic applications that employ diffracting wavefields in the tomographic reconstruction process”.

At the beginning of the 1980s, this name was generally used to refer to recon-

struction processes used in ultrasonic and microwave imaging and based upon the *generalized projection slice theorem*. This theorem is an extension of the *projection slice theorem* of classical *Computerized Tomography* (CT). It accounts for diffraction and relates, on a limited support in the spatial frequency plane, the Fourier transform of a contrast function depending upon the physical parameters of the object under test to the Fourier transform of the scattered field that results from the interaction between this object and a known interrogating wave. The generalized projection slice theorem is derived under first order linearizing assumptions (Born or Rytov approximations), so that *diffraction tomography* was paradoxically used to refer to reconstruction techniques adapted to weak-scattering cases. Now this term is used in accordance with its first above-mentioned definition; it includes reconstruction algorithms based upon the generalized projection slice theorem as well as iterative nonlinear inversion schemes adapted to highly scattering cases. As in the ultrasonic and microwave domains, the linearized version of diffraction tomography was first applied to optical imaging of weakly scattering structures and it has been proven to yield good results, e.g. for low-contrasted biological samples [3, 4].

It suffers, however, from two major drawbacks: its resolution is limited as evanescent waves are neglected and it fails to provide quantitative information about objects with high dielectric contrasts [5, 6] as those encountered in the nanotechnology domain considered here, where multiple scattering cannot be neglected. This is the reason why we consider, herein, an iterative algorithm able to handle the nonlinear problem at hand. The latter consists in the inversion of two coupled integral equations where, in addition to the contrast, the total field induced within the object appears also as unknown. It can be noted that the application of nonlinear inversion algorithms to optical imaging is very recent [7] and is linked to the appearance of interferometric devices able to provide accurate measurements of the phase of the fields [8].

In addition to being nonlinear, inverse scattering problems are also well-known to be ill-posed which means that a regularization is required prior to their resolution. This regularization is generally performed by accounting for any *a priori* information available on the object. In the present case, we consider man-made objects that are known to be composed of compact homogeneous regions made of a finite number of different materials. Taking into account such *a priori* information is not straightforward with deterministic methods such as that developed in [7], which look for the solution through an iterative minimization of a cost functional that expresses the discrepancy between the data and the scattered fields computed by means of the current solution, as this information must be introduced in the cost functional to be minimized. On the contrary, the method presented herein, developed in the statistical framework of *Bayesian estimation* [9], is particularly well suited for this purpose. The *a priori* information is introduced through a *Gauss-Markov-Potts model* [10, 11], the marginal distribution of contrast being sought for as a *Gaussian mixture* [12] where each Gaussian law represents a class of materials, and the compactness of the regions being accounted for by means of a *hidden Markov model*.

This method was successfully applied first in the framework of microwave imaging [13] in a configuration where frequency-diverse quasi-complete data were available, which means that the scattered fields were measured all around the object for several illumination directions and several frequencies, and then in the framework

of optical imaging [14] in a single-frequency aspect-limited reflection data configuration similar to that considered herein, where the limited aspect of the data enhances the ill-posed nature of the inverse problem and makes the introduction of prior information more essential. Although good results have been obtained in both cases, this was however at the price of heavy computational burdens, particularly due to the *MCMC (Monte-Carlo Markov Chain) sampling method* that estimates the posterior means of the unknown variables by means of a *Gibbs sampling algorithm* [15–17]. Herein, we take a different way. The posterior law of the unknowns is estimated by means of an analytical approximation based upon the *Variational Bayes Approximation method* (VBA, [18]). The latter has been first introduced in the Bayesian inference field for neural network applications [19, 20], then for graphical model learning [21] and model parameter estimation [22]. Its appearance in the field of inverse problems is relatively recent and has first concerned image restoration [23, 24] and source separation problems [25].

In the problem considered herein, one of the major difficulties in finding the joint estimator is the mutual dependence between the different variables. Therefore, the idea is to approximate the true posterior by a free form separable distribution that minimizes the *Kullback-Leibler divergence* [26] that has some attractive properties for optimization. Once the approximate distribution has been built up, the estimator should be easily obtained. There is no rules for choosing the separation form; the latter is usually dedicated to the application. Herein, a strong separation form is chosen, all the variables being considered separately. A solution of this functional optimization problem can be found in terms of exponential distributions whose shaping parameters are estimated in an iterative way. It can be noted that, at each iteration, the updating expressions of these parameters look like those that would be obtained if a gradient type method was used to solve the optimization problem. Furthermore, the gradient and the updating step have a meaning in terms of probabilistic moments (mean, variances, ...).

THE EXPERIMENTAL CONFIGURATION

The two objects ($\mathcal{O}1$ and $\mathcal{O}2$) considered herein, whose cross-sections Ω are depicted in Figure 1, are made of parallel resin rods of long extent lying on a silicon substrate. Object $\mathcal{O}1$ consists of two rods of height $0.14\ \mu\text{m}$ and widths $1\ \mu\text{m}$ and $0.5\ \mu\text{m}$, respectively, $0.5\ \mu\text{m}$ distant from one another and object $\mathcal{O}2$ is made of three rods of height $0.11\ \mu\text{m}$ and width $0.2\ \mu\text{m}$, $0.3\ \mu\text{m}$ distant from one another. The substrate is of known relative permittivity and its dimensions are large as compared to those of the rods, so that the configuration is modelled as follows: an object made of resin lies in the upper layer of a stratified medium made of two semi-infinite half-spaces separated by a planar interface γ_{12} . The upper half-space \mathcal{D}_1 is air and the lower one \mathcal{D}_2 is silicon. The different media are supposed to be lossless and they are characterized by their propagation constant k_m ($m = 1, 2$ or Ω) such that $k_m^2 = \omega^2 \varepsilon_0 \varepsilon_m \mu_0$, where ω is the angular frequency, ε_0 ($\varepsilon_0 = 8.854 \times 10^{-12}\ \text{F/m}$) and μ_0 ($\mu_0 = 4\pi \times 10^{-7}\ \text{H/m}$) are the dielectric permittivity and the magnetic permeability of free space, respectively, and ε_m is the relative dielectric permittivity of medium \mathcal{D}_m ($\varepsilon_1 = 1$, $\varepsilon_2 = 15.07$ and $\varepsilon_\Omega = 2.66$). Let us note that ε_Ω and Ω are supposed to be unknown in the inversion process.

The object is supposed to be contained in a test domain \mathcal{D} ($\mathcal{D} \subset \mathcal{D}_1$) and we introduce a contrast function χ representative of its electromagnetic parameters, such that $\chi(\mathbf{r}) = k^2(\mathbf{r}) - k_1^2$, defined in \mathcal{D} and null outside Ω . The object is

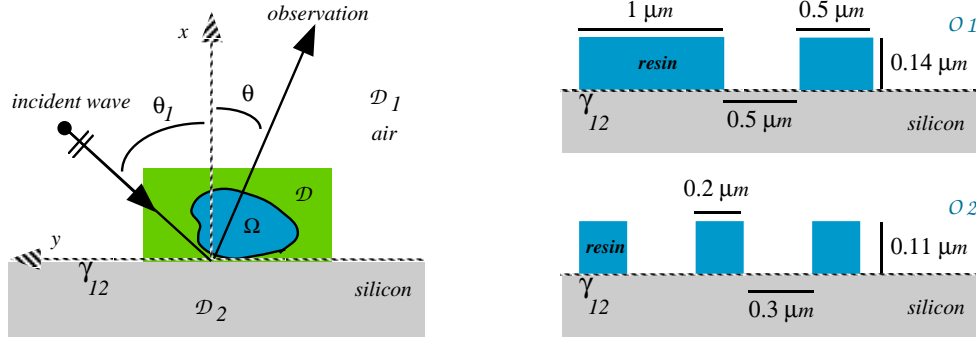


Figure 1. The configuration (left) and the geometries (right) of objects $\mathcal{O}1$ (up) and $\mathcal{O}2$ (down).

illuminated by an incident wave generated by a Helium-Neon laser, operating at a 633nm wavelength, coupled with a reflection microscope equipped with an interferometric device able to provide accurate measurements of the phase of the scattered fields. The incident wave, whose implied time-dependence is chosen as $\exp(-i\omega t)$, can be considered as a plane wave whose electric field E^{inc} is polarized in the γ_{12} interface plane along the Oz axis parallel to the axis of the rods. The latter are supposed to be invariant along this axis so that a 2D configuration will be considered in a transverse magnetic polarization case, which leads to scalar field formulations. The direction of propagation of the incident wave θ_1 can be varied in the range $\pm 32^\circ$; hence N_v views are carried out at varying θ_1 ($N_v = 8$ for $\mathcal{O}1$ and $N_v = 10$ for $\mathcal{O}2$), each view being constituted of measurements of the scattered field in the far field domain \mathcal{S} at N_r different observation angles θ in the range $\pm 46^\circ$ ($N_r = 611$ for $\mathcal{O}1$ and $N_r = 668$ for $\mathcal{O}2$).

The configuration described above is that of a laboratory controlled experiment led at Institut Fresnel (Marseille, France) and thoroughly detailed in [27]. The data collected in this experiment (courtesy of G. Maire, A. Sentenac and K. Belkebir) have been used to validate our forward model and test the inversion algorithm.

THE FORWARD MODEL

The modelling is based upon domain integral representations obtained by applying Green's theorem to the Helmholtz wave equations satisfied by the fields and by accounting for continuity and radiation conditions [28, 29]. This leads to two coupled contrast-source integral equations. The first one, denoted as the *coupling* (or *state*) equation, relates the total electric field E in \mathcal{D} to Huyghens-type sources $w(\mathbf{r}')$ induced within the target by the incident wave, i.e. $w(\mathbf{r}') = \chi(\mathbf{r}')E(\mathbf{r}')$, where χ is the contrast function:

$$E(\mathbf{r}) = E^{inc}(\mathbf{r}) + \int_{\mathcal{D}} \mathcal{G}(\mathbf{r}, \mathbf{r}') w(\mathbf{r}') d\mathbf{r}', \quad \mathbf{r} \in \mathcal{D}. \quad (1)$$

$\mathcal{G}(\mathbf{r}, \mathbf{r}')$ is the Green's function of the stratified medium that will be detailed below and E^{inc} is the incident field, i.e. the field that would exist in the absence of object:

$$E^{inc}(\mathbf{r}) = \exp(-ik_1(x \cos(\theta_1) + y \sin(\theta_1))) + R \exp(ik_1(x \cos(\theta_1) - y \sin(\theta_1))), \quad (2)$$

$$R = \frac{k_1 \cos(\theta_1) - k_2 \cos(\theta_2)}{k_1 \cos(\theta_1) + k_2 \cos(\theta_2)}, \quad \text{with } \theta_2 \text{ such that } k_1 \sin(\theta_1) = k_2 \sin(\theta_2).$$

The second equation is a Fredholm integral equation of the first kind denoted as *observation* equation. It relates the scattered field E^{dif} observed on \mathcal{S} to the induced sources $w(\mathbf{r}')$:

$$E^{dif}(\mathbf{r}) = \int_{\mathcal{D}} \mathcal{G}(\mathbf{r}, \mathbf{r}') w(\mathbf{r}') d\mathbf{r}', \quad \mathbf{r} \in \mathcal{S}. \quad (3)$$

It is important to note that, in opposition to that of free space which takes a simple analytic form, the Green's function of the stratified medium $\mathcal{G}(\mathbf{r}, \mathbf{r}')$, which represents the radiation of a line source located at \mathbf{r}' and observed at \mathbf{r} in the absence of object, is given, in the spectral domain associated to y [30, 31], by a rather involved expression:

$$\mathcal{G}(\mathbf{r}, \mathbf{r}') = \frac{1}{2\pi} \int_{-\infty}^{+\infty} g(x, x', \alpha) \exp(i\alpha(y - y')) d\alpha. \quad (4)$$

It is obtained by decomposing the wave emitted by the source into a spectrum of plane waves with varying incidences, each of them being then reflected or transmitted at the interface γ_{12} , and, finally, by adding the contributions of all the elementary plane waves at the observation point. Accounting for the fact that, herein, both the source (\mathbf{r}') and the observation (\mathbf{r}) locations are in medium \mathcal{D}_1 , the plane wave spectrum $g(x, x', \alpha)$ reads:

$$g(x, x', \alpha) = \frac{i}{2\beta_1} \left[\exp(i\beta_1 |x - x'|) + \frac{\beta_1 - \beta_2}{\beta_1 + \beta_2} \exp(i\beta_1(x + x')) \right], \quad (5)$$

$$\beta_m = \sqrt{k_m^2 - \alpha^2}, \quad \Im m(\beta_m) \geq 0, \quad m = 1, 2.$$

It is made of two terms whose first one represents the direct contribution, i.e. the spectral development of the free space Green's function in medium \mathcal{D}_1 ($iH_0^1(k_1 |\mathbf{r} - \mathbf{r}'|)/4$ with H_0^1 the zero order Hankel function of the first kind), and whose second one accounts for reflection on the γ_{12} interface. By accounting for the fact that the scattered fields are measured in directions θ ($\mathbf{r} = (r, \theta) \in \mathcal{S}$) at fixed r in the far field, an approximate expression \mathcal{G}^o of \mathcal{G} [14] can be found by means of *the stationary phase method* [32] and used in the observation equation:

$$\mathcal{G}^o(\theta, \mathbf{r}') = i \left[\exp(-i\beta_1(\theta)x') + \mathcal{R}(\theta) \exp(i\beta_1(\theta)x') \right] \frac{\exp \left[-i(\alpha(\theta)y' + \frac{\pi}{4}) \right]}{\sqrt{8\pi k_1}},$$

$$\alpha(\theta) = k_1 \sin(\theta), \quad \beta_m(\theta) = \sqrt{k_m^2 - \alpha(\theta)^2} \text{ for } m = 1, 2, \quad \mathcal{R}(\theta) = \frac{\beta_1(\theta) - \beta_2(\theta)}{\beta_1(\theta) + \beta_2(\theta)}. \quad (6)$$

Assuming that χ and E^{inc} are known, solving the direct problem consists in solving first equation (1) for w and then equation (3) for E^{dif} . This is done from discrete counterparts of these equations obtained by applying *a moment method* with pulse basis functions and point matching [33], which results in partitioning the object domain into $N_{\mathcal{D}}$ elementary square pixels small enough in order to consider the permittivity and the total field as constant over each of them. By rewriting equation (1) in order to express the induced sources, this leads to the two following linear

systems:

$$w(\mathbf{r}_i) = \chi(\mathbf{r}_i)E^{inc}(\mathbf{r}_i) + \chi(\mathbf{r}_i) \sum_{j=1}^{N_D} \mathcal{H}_{ij}^D w(\mathbf{r}_j), \quad i = 1, \dots, N_D, \quad (7)$$

$$E^{dif}(\theta_n) = \sum_{j=1}^{N_D} \mathcal{H}_{nj}^S w(\mathbf{r}_j), \quad n = 1, \dots, N_r, \quad (8)$$

where the elements \mathcal{H}_{ij}^D and \mathcal{H}_{nj}^S result from the integration over the elementary square pixels of the Green's functions \mathcal{G} and \mathcal{G}^o , respectively. The computation of the latter does not pose any problem as \mathcal{G}^o is known in the spatial domain and, hence, a closed form expression of \mathcal{H}_{nj}^S is easily obtained:

$$\begin{aligned} \mathcal{H}_{nj}^S = & i \sqrt{\frac{2}{\pi k_1}} \frac{\sin(\beta_1(\theta_n)a) \sin(\alpha(\theta_n)a)}{\alpha(\theta_n) \beta_1(\theta_n)} \exp\left(-i \left[\alpha(\theta_n)y_j + \frac{\pi}{4}\right]\right) \\ & \times [\exp(-i\beta_1(\theta_n)x_j) + \mathcal{R}(\theta_n) \exp(i\beta_1(\theta_n)x_j)], \end{aligned} \quad (9)$$

where a is the half-side of the pixel.

On the contrary \mathcal{G} is known in the spectral domain; this suggests a solution of equation (7) by means of a method such as *the Conjugate Gradient Fast Fourier Transform method* (CG-FFT, [34]) which allows us to save time by performing the computations of the convolution/correlation products in the spectral domain. Details on such computations, in a configuration similar to that considered herein, can be found in [30]. It can be noted that, here, the two terms of the Green's function must be processed separately as the direct contribution has a singular behaviour when $\mathbf{r} = \mathbf{r}'$. Hence the elements \mathcal{H}_{ij}^{Ds} corresponding to the singular contribution can be computed in an approximate way in the spatial domain, as it is usually done in homogeneous media, by replacing integration over the square pixel by an integration over a disc of same area [35], which leads to:

$$\mathcal{H}_{ij}^{Ds} = \begin{cases} \frac{1}{k_1^2} \left(\frac{i\pi k_1 \Delta}{2} H_1^1(k_1 \Delta) - 1 \right) & \text{if } i = j \\ \frac{i\pi \Delta}{2k_1} H_0^1(k_1 |\mathbf{r}_i - \mathbf{r}_j|) J_1(k_1 \Delta) & \text{if } i \neq j \end{cases}, \quad (10)$$

where J_1 and H_1^1 are the first-order Bessel function and the first-order Hankel function of the first kind, respectively, and $\Delta = 2a/\sqrt{\pi}$. As for the coefficients \mathcal{H}_{ij}^{Dns} corresponding to the non-singular part of the Green's function, their spectral counterparts h_{ij}^{Dns} read:

$$h_{ij}^{Dns} = \frac{2 i \sin(\alpha a) \sin(\beta_1 a)}{\alpha \beta_1^2} \frac{\beta_1 - \beta_2}{\beta_1 + \beta_2} \exp[i\beta_1(x_j + x_i)]. \quad (11)$$

Figure 2 displays the results obtained in this way for the two objects depicted in Figure 1. The object domain is partitioned into $N_D = 512 \times 32$ square pixels with half-side a and is illuminated from direction θ_1 such that $a = 3.7 \text{ nm}$ and $\theta_1 = -17.52^\circ$ for $\mathcal{O}1$ and $a = 2.335 \text{ nm}$ and $\theta_1 = -14.82^\circ$ for $\mathcal{O}2$. Generally, the

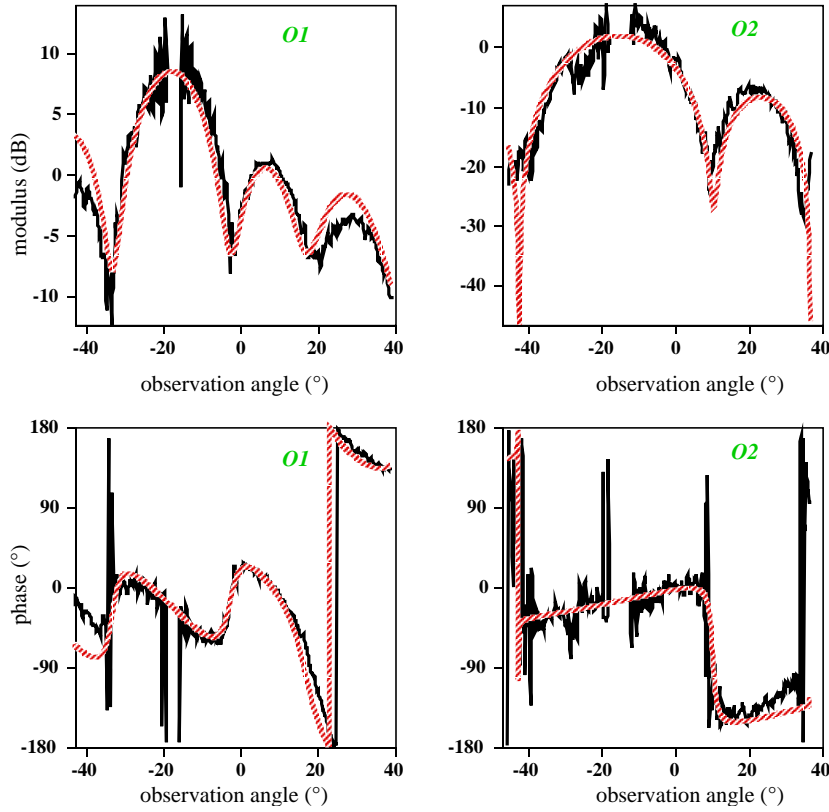


Figure 2. Modulus (up) and phase (down) of the computed (red, dashed line) and measured (black, full line) scattered fields for object $\mathcal{O}1$ illuminated from direction $\theta_1 = -17.52^\circ$ (left) and for object $\mathcal{O}2$ illuminated from direction $\theta_1 = -14.82^\circ$ (right).

scattered fields are correctly described. It can be noted, however, that the measured fields are very noisy, especially in directions close to the specular reflection. This can be explained by the fact that the scattered field is negligible as compared to the incident field and, hence, cannot be accurately determined in these directions. For the same reason, data are missing in the vicinity of the specular direction.

BAYESIAN INVERSION APPROACH

First, let us define two vectors, ϵ and ξ , that represent all the errors: measurement uncertainties and model errors (due to discretization and other approximations) and let us assume that these error terms satisfy centred Gaussian distributions with variances ρ_ϵ^2 and ρ_ξ^2 , respectively. By accounting for these errors and for the different views v ($v = 1, \dots, N_v$), the discrete forward model (equations (7) and (8)) can be rewritten in a matrix operator notation as follows:

$$\mathbf{E}_v^{dif} = \mathcal{H}^S \mathbf{w}_v + \epsilon_v, \quad (12)$$

$$\mathbf{w}_v = \chi \mathbf{E}_v^{inc} + \chi \mathcal{H}^D \mathbf{w}_v + \xi_v. \quad (13)$$

\mathbf{E}_v^{dif} , \mathbf{E}_v^{inc} and \mathbf{w}_v are complex vectors that contain the scattered field data, the incident fields and the induced sources corresponding to the different views, χ is a real vector that contains the values of the contrast at the centres of

the pixels and \mathcal{H}^S and \mathcal{H}^D are operators which act from $L^2(\mathcal{D})$ onto $L^2(\mathcal{S})$ and from $L^2(\mathcal{D})$ onto itself and are represented by high-dimensional matrices whose elements are \mathcal{H}_{nj}^S and \mathcal{H}_{ij}^D , respectively. The goal is now to estimate both the contrast χ and the induced sources \mathbf{w}_v from the scattered field data \mathbf{E}_v^{dif} .

As underlined above, it is now necessary to take into account the *a priori information* available on the sought object. The information that we would like to account for is that the object is composed of a finite number N_k of homogeneous materials. This prior information is introduced by means of a hidden variable $z(\mathbf{r})$ associated to each pixel \mathbf{r} . This label defines the different classes of materials and the pixels with a given class k can be characterized by a contrast that satisfies a Gaussian distribution:

$$p(\chi(\mathbf{r})|z(\mathbf{r}) = k) = \mathcal{N}(m_k, \rho_k^2), \quad k = 1, \dots, N_k, \quad (14)$$

with mean value m_k and variance ρ_k^2 . The information that the different materials are distributed in compact homogeneous regions is accounted for by means of a Potts-Markov model on \mathbf{z} that expresses the spatial dependence between the neighbouring pixels:

$$p(\mathbf{z}) = \frac{1}{\Xi} \exp \left(\frac{\Upsilon}{2} \sum_{i=1}^{N_D} \sum_{\mathbf{r}_j \in \mathcal{V}(\mathbf{r}_i)} \delta[z(\mathbf{r}_i) - z(\mathbf{r}_j)] \right), \quad (15)$$

where Ξ is a normalization constant, Υ determines the correlation between neighbours (herein $\Upsilon = 2$), $\delta(0) = 1$ and $\delta(t) = 0$ if $t \neq 0$. $\mathcal{V}(\mathbf{r}_i)$ is the neighbourhood of \mathbf{r}_i , herein made of the four nearest pixels.

From now on, the various parameters that appear in the probability distributions defined above, such as ρ_ϵ^2 , ρ_ξ^2 , m_κ and ρ_κ^2 , will be denoted as the *hyper-parameters* and gathered in the vector ψ ($\psi = \{\rho_\epsilon^2, \rho_\xi^2, (m_\kappa, \rho_\kappa^2, \kappa = 1, \dots, N_\kappa)\}$).

It can be noted that an unsupervised context is considered herein where the contrast χ , the induced currents \mathbf{w} , the segmentation \mathbf{z} and the hyper-parameters of the model ψ are estimated simultaneously. Using the Bayes rule, we get:

$$p(\chi, \mathbf{w}, \mathbf{z}, \psi | \mathbf{E}^{dif}) \propto p(\mathbf{E}^{dif} | \mathbf{w}) p(\mathbf{w} | \chi) p(\chi | \mathbf{z}) p(\mathbf{z}) p(\psi). \quad (16)$$

In the above relationship, $p(\chi | \mathbf{z})$ and $p(\mathbf{z})$ are given by equations (14) and (15), whereas $p(\mathbf{E}^{dif} | \mathbf{w})$ and $p(\mathbf{w} | \chi)$ are obtained from the observation and the coupling equations, respectively. They read:

$$p(\mathbf{E}^{dif} | \mathbf{w}) = \prod_v \left(\frac{1}{2\pi\rho_\epsilon^2} \right)^{\frac{N_r}{2}} \exp \left(-\frac{1}{2\rho_\epsilon^2} \|\mathbf{E}_v^{dif} - \mathcal{H}^S \mathbf{w}_v\|_S^2 \right), \quad (17)$$

$$p(\mathbf{w}_v | \chi) \propto \exp \left(-\frac{1}{2\rho_\xi^2} \|\mathbf{w}_v - \chi \mathbf{E}_v^{inc} - \chi \mathcal{H}^D \mathbf{w}_v\|_D^2 \right).$$

where $\|\cdot\|_{\mathcal{A}}$ represents the norm associated to the inner product $\langle \cdot, \cdot \rangle_{\mathcal{A}}$ in

$L^2(\mathcal{A})$ ($\mathcal{A} = \mathcal{S}$ or \mathcal{D}). As for $p(\boldsymbol{\psi})$, it is a set of priors chosen in a conjugate way [36]. This means that the different variances satisfy *Inverse Gamma laws* (\mathcal{IG}), i.e. $p(\rho^2) = \mathcal{IG}(\eta, \phi) \propto \left[(1/\rho^2)^{(\eta+1)} \exp(-\phi/\rho^2) \right]$, and the different means satisfy Gaussian laws, i.e. $p(m_\kappa) = \mathcal{N}(\mu_\kappa, \tau_\kappa)$, with *meta-hyper-parameters* (η, ϕ, μ, τ) set to satisfy non-informative flat prior distributions.

BAYESIAN COMPUTATIONS

All the right hand side expressions of Equation (16) are known, which allows us to obtain the left hand side expression, i.e. the joint posterior law of all the unknowns, up to a normalizing constant. From this expression, different inferences can be done on these unknowns. The usual way is to define a point estimator, e.g. MAP or PM. In general, easy expressions for any of these two estimators are very hard to obtain. Hence, an approximation of the posterior law must be performed. We opt for an analytical approximation based upon VBA. The idea is to approximate the true posterior $p(\boldsymbol{w}, \boldsymbol{\chi}, \boldsymbol{z}, \boldsymbol{\psi} | \boldsymbol{E}^{scat})$ with a free form separable distribution $q(\boldsymbol{w}, \boldsymbol{\chi}, \boldsymbol{z}, \boldsymbol{\psi})$ that minimizes the Kullback-Leibler divergence $KL(q||p) = \int q \ln(q/p)$. First, let us define the separable form:

$$q(\boldsymbol{w}, \boldsymbol{\chi}, \boldsymbol{z}, \boldsymbol{\psi}) = \prod_i q(w_i) \prod_j q(\chi_j) \prod_l q(z_l) \prod_k q(\rho_k) q(m_k) q(\rho_\epsilon) q(\rho_\xi). \quad (18)$$

Then, let us look for the optimal form of q that minimizes the Kullback divergence. This leads to the following parametric distributions:

$$\begin{aligned} q(\boldsymbol{w}) &= \mathcal{N}(\tilde{\boldsymbol{m}}_w, \tilde{\boldsymbol{V}}_w), \quad q(\boldsymbol{\chi}) = \mathcal{N}(\tilde{\boldsymbol{m}}_\chi, \tilde{\boldsymbol{V}}_\chi), \quad q(\boldsymbol{z}) = \prod_{\boldsymbol{r}} \tilde{\zeta}_k(\boldsymbol{r}), \\ q(m_k) &= \mathcal{N}(\tilde{\mu}_k, \tilde{\tau}_k), \quad q(\rho_k^2) = \mathcal{IG}(\tilde{\eta}_k, \tilde{\phi}_k), \quad k = 1, \dots, N_k, \\ q(\rho_\varrho^2) &= \mathcal{IG}(\tilde{\eta}_\varrho, \tilde{\phi}_\varrho), \quad \varrho = \epsilon, \xi, \end{aligned} \quad (19)$$

where the tilded variables are mutually dependent and are computed in an iterative way. The expressions of these variables at iteration step n are detailed below. Let us note that, in the following, the superscript $n-1$ is omitted for clarity considerations, which means that the values of the variables without superscript are those obtained at iteration step $n-1$, and $\tilde{\boldsymbol{M}}$ and $\tilde{\boldsymbol{V}}$ are diagonal matrices built up from the components of vectors $\tilde{\boldsymbol{m}}$ and $\tilde{\boldsymbol{v}}$, respectively, i.e. $\tilde{\boldsymbol{M}} = \text{Diag}(\tilde{\boldsymbol{m}})$ and $\tilde{\boldsymbol{V}} = \text{Diag}(\tilde{\boldsymbol{v}})$.

- Concerning the currents \mathbf{w} , we get:

$$q(\mathbf{w}) = \prod_{i=1}^{N_D} q(w(\mathbf{r}_i)) = \mathcal{N}(\tilde{\mathbf{m}}_w, \tilde{\mathbf{V}}_w), \quad (20)$$

$$\tilde{\mathbf{V}}_w^n = \left[\text{Diag} \left(\overline{\rho_\epsilon^{-2}} \Gamma^S + \overline{\rho_\xi^{-2}} \Gamma_\chi^D \right) \right]^{-1}, \quad (21)$$

$$\begin{aligned} \tilde{\mathbf{m}}_w^n = \tilde{\mathbf{m}}_w + \left(\tilde{\mathbf{V}}_w^n \right) & \left[\overline{\rho_\epsilon^{-2}} \mathcal{H}^{S\dagger} \left(\mathbf{E}^{dif} - \mathcal{H}^S \tilde{\mathbf{m}}_w \right) + \overline{\rho_\xi^{-2}} \left(\tilde{\mathbf{M}}_\chi \mathbf{E}^{inc} + \tilde{\mathbf{M}}_\chi \mathcal{H}^D \tilde{\mathbf{m}}_w \right. \right. \\ & \left. \left. - \tilde{\mathbf{m}}_w - \mathcal{H}^{D\dagger} (\tilde{\mathbf{M}}_\chi^2 + \tilde{\mathbf{V}}_\chi) \mathbf{E}^{inc} + \mathcal{H}^{D\dagger} \tilde{\mathbf{M}}_\chi^\dagger \tilde{\mathbf{m}}_w - \mathcal{H}^{D\dagger} \left(\tilde{\mathbf{M}}_\chi^2 + \tilde{\mathbf{V}}_\chi \right) \mathcal{H}^D \tilde{\mathbf{m}}_w \right) \right], \end{aligned}$$

where overbar denotes the expectation of the variable with respect to q (i.e. $\bar{a} = \mathbb{E}(a)_q$), superscript \dagger indicates the conjugate transpose and Γ^S and Γ_χ^D are such that:

$$\Gamma^S(\mathbf{r}_j) = \sum_{i=1}^{N_r} |\mathcal{H}_{ij}^S|^2 \text{ and}$$

$$\overline{\Gamma_\chi^D}(\mathbf{r}_j) = 1 - 2 \Re \{ \mathcal{H}_{jj}^D \tilde{m}_\chi(\mathbf{r}_j) \} + (|\tilde{m}_\chi(\mathbf{r}_j)|^2 + \tilde{v}_\chi(\mathbf{r}_j)) \sum_{i=1}^{N_D} |\mathcal{H}_{ij}^D|^2.$$

- Concerning the contrast χ , we get:

$$q(\chi) = \prod_{i=1}^{N_D} q(\chi(\mathbf{r}_i)) = \mathcal{N}(\tilde{\mathbf{m}}_\chi, \tilde{\mathbf{V}}_\chi), \quad (22)$$

$$\tilde{\mathbf{V}}_\chi^n = \left[\overline{\rho_\xi^{-2}} \overline{E^2} + \overline{\mathbf{V}_\chi^{-1}} \right]^{-1}, \quad \tilde{\mathbf{m}}_\chi^n = (\tilde{\mathbf{V}}_\chi^n) \left[\sum_k \overline{\rho_k^{-2}} \tilde{\mu}_k \tilde{\zeta}_k + \overline{\rho_\xi^{-2}} \mathbf{w}^* \mathbf{E} \right], \quad (23)$$

where $*$ denotes the complex conjugate and $\overline{\mathbf{w}^* \mathbf{E}}$, the expectation of vector $\mathbf{w}^* \mathbf{E}$, is such that:

$$\overline{\mathbf{w}^* \mathbf{E}}(\mathbf{r}_i) = \sum_1^{N_v} E^{inc}(\mathbf{r}_i) \tilde{m}_w^*(\mathbf{r}_i) + \tilde{m}_w^*(\mathbf{r}_i) \sum_{j=1}^{N_D} \mathcal{H}_{ij}^D \tilde{m}_w(\mathbf{r}_j) + \mathcal{H}_{ii}^D \tilde{v}_w(\mathbf{r}_i). \quad (24)$$

$\overline{E^2}$ and $\overline{\mathbf{V}_\chi^{-1}}$ are diagonal matrices whose elements read:

$$\begin{aligned} \overline{E^2}_{ii} = \sum_1^{N_v} |E^{inc}(\mathbf{r}_i)|^2 + 2 \Re \{ \mathbf{E}^{inc*}(\mathbf{r}_i) \mathcal{H}_{ii}^D \tilde{\mathbf{m}}_w(\mathbf{r}_i) \} \\ + \left| \sum_{j=1}^{N_D} \mathcal{H}_{ij}^D \tilde{m}_w(\mathbf{r}_j) \right|^2 + \sum_{j=1}^{N_D} |\mathcal{H}_{ij}^D|^2 \tilde{v}_w(\mathbf{r}_j) \end{aligned}$$

and $\overline{\mathbf{V}_\chi^{-1}}_{ii} = \sum_k \tilde{\zeta}_k(\mathbf{r}_i) \overline{\rho_k^{-2}}$, respectively.

- The hidden field \mathbf{z} is such that:

$$\tilde{\zeta}_k(\mathbf{r}) \propto \exp \left[-\frac{1}{2} \left(\Psi(\tilde{\eta}_k) + \log(\tilde{\phi}_k) + \overline{\rho_k^{-2}} [(\tilde{m}_\chi(\mathbf{r}) - \tilde{\mu}_k)^2 + \tilde{\tau}_\kappa + \tilde{v}_\chi(\mathbf{r})] - \Upsilon \sum_{\mathbf{r}' \in \mathcal{V}(\mathbf{r})} \tilde{\zeta}_k(\mathbf{r}') \right) \right], \quad (25)$$

where Ψ is the digamma function.

- Let us now detail the hyper-parameters:
 - the observation noise variance ρ_ϵ^2 is such that:

$$\tilde{\phi}_\epsilon = \phi_\epsilon + \frac{N_r}{2}, \quad (26)$$

$$\tilde{\eta}_\epsilon = \eta_\epsilon + \frac{1}{2} \left(\|\mathbf{E}^{dif}\|_{\mathcal{S}}^2 + \|\mathcal{H}^{\mathcal{S}} \tilde{\mathbf{m}}_w\|_{\mathcal{S}}^2 - 2 \Re \left\{ \mathbf{E}^{dif\dagger} \mathcal{H}^{\mathcal{S}} \tilde{\mathbf{m}}_w \right\} + \|\mathcal{H}^{\mathcal{S}^2} \tilde{\mathbf{v}}_w\|_{L^1} \right),$$

where $\|\cdot\|_{L^1}$ stands for the L^1 norm and the elements of $\mathcal{H}^{\mathcal{S}^2}$ are the squared elements of $\mathcal{H}^{\mathcal{S}}$.

- the coupling noise variance ρ_ξ^2 is such that:

$$\tilde{\phi}_\xi = \phi_\xi + \frac{N_D}{2}, \quad (27)$$

$$\tilde{\eta}_\xi = \eta_\xi + \frac{1}{2} \left(\|\tilde{\mathbf{m}}_w\|_{\mathcal{D}}^2 + \|\tilde{\mathbf{V}}_w\|_{L^1} + \|(\tilde{\mathbf{M}}_\chi^2 + \tilde{\mathbf{V}}_\chi) \overline{\mathbf{E}^2}\|_{L^1} - 2 \Re \left\{ \tilde{\mathbf{m}}_\chi^t \overline{\mathbf{w}^* \mathbf{E}} \right\} \right),$$

where superscript t stands for transpose and $\tilde{\mathbf{M}}_\chi^2 = \tilde{\mathbf{M}}_\chi^* \tilde{\mathbf{M}}_\chi$.

- the class variances ρ_k^2 are such that:

$$\tilde{\phi}_k = \phi_0 + \frac{\sum_{i=1}^{N_D} \tilde{\zeta}_k(\mathbf{r}_i)}{2}, \quad (28)$$

$$\tilde{\eta}_k = \eta_0 + \frac{1}{2} \sum_{i=1}^{N_D} \tilde{\zeta}_k(\mathbf{r}_i) [\tilde{m}_\chi(\mathbf{r}_i)^2 + \tilde{v}_\chi(\mathbf{r}_i) + \tilde{\mu}_k^2 + \tilde{\tau}_\kappa - 2 \tilde{\mu}_k \tilde{m}_\chi(\mathbf{r}_i)].$$

- and the class means m_k such that:

$$\tilde{\tau}_k = \left[\tau_0^{-1} + \overline{\rho_k^{-2}} \sum_{i=1}^{N_D} \tilde{\zeta}_k(\mathbf{r}_i) \right]^{-1}, \quad \tilde{\mu}_k = \tilde{\tau}_k \left[\frac{\mu_0}{\tau_0} + \overline{\rho_k^{-2}} \sum_{i=1}^{N_D} \tilde{\zeta}_k(\mathbf{r}_i) \tilde{m}_\chi(\mathbf{r}_i) \right]. \quad (29)$$

Finally, the reconstruction algorithm can be summarized as follows. First, the variables and parameters are initialized as in [14] (section 4.6). Then, starting from the shaping parameters obtained at iteration step (n-1):

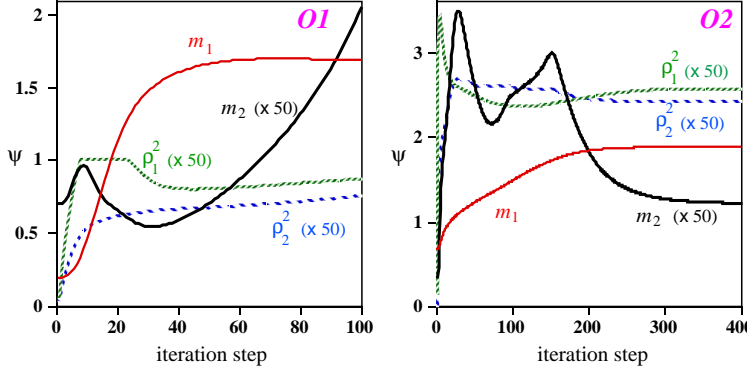


Figure 3. Evolution of the means m_k and variances ρ_k^2 of the contrast for the classes $k=1$ (resin) and $k=2$ (air) during the iterative process for objects $\mathcal{O}1$ (left) and $\mathcal{O}2$ (right): m_1 (red), $m_2 \times 50$ (black), $\rho_1^2 \times 50$ (green dotted line) and $\rho_2^2 \times 50$ (blue dashed line).

- (1) \tilde{V}_w^n and \tilde{m}_w^n are updated by using equations (21),
- (2) \tilde{V}_χ^n and \tilde{m}_χ^n are updated by using equations (23),
- (3) $\tilde{\zeta}^n$ is updated by using equation (25),
- (4) $\tilde{\phi}_\epsilon^n$ and $\tilde{\eta}_\epsilon^n$ are updated by using equations (26),
- (5) $\tilde{\phi}_\xi^n$ and $\tilde{\eta}_\xi^n$ are updated by using equations (27),
- (6) $\tilde{\phi}_k^n$ and $\tilde{\eta}_k^n$ are updated by using equations (28),
- (7) $\tilde{\tau}_k^n$ and $\tilde{\mu}_k^n$ are updated by using equations (29).

Steps 1) to 7) are iterated until convergence is reached. The latter is estimated empirically by looking to the evolution of contrast and hyper-parameters in the course of iterations (see Figure 3). Finally, the PM estimator (e.g. $\hat{\chi} = \tilde{m}_\chi^{n_{max}}$ for the contrast) can then be easily obtained from the approximated posteriors.

RESULTS

Figure 4 displays the results obtained with the above inversion algorithm for the two objects depicted in Figure 1. The test domain \mathcal{D} is partitioned into 32×512 pixels with half-side a ($a = 3.7$ nm for $\mathcal{O}1$ and $a = 2.335$ nm for $\mathcal{O}2$), which leads to reconstruction areas of $0.237 \mu\text{m} \times 3.789 \mu\text{m}$ for $\mathcal{O}1$ and $0.149 \mu\text{m} \times 2.391 \mu\text{m}$ for $\mathcal{O}2$, whereas 100 and 300 iterations are needed in these cases, respectively, to reach convergence. In general, the algorithm succeeds in retrieving homogeneous regions that correspond to the resin rods (Figure 4-2nd row) with accurate values of the contrast, as it can be observed in Figure 4-last row, which depicts the contrast profile retrieved along a line at height x'' ($x'' = 0.1 \mu\text{m}$ for $\mathcal{O}1$ and $x'' = 0.05 \mu\text{m}$ for $\mathcal{O}2$) as compared to the true profile. The geometry of the retrieved object is sometimes slightly different from the real one. The results are, however, much more accurate than those obtained by means of the *Contrast Source Inversion method* (CSI, [37]) after 100 iteration steps (Figure 4-1st row). The latter is an iterative deterministic method which consists in minimizing a cost functional that accounts for both observation and coupling equations by alternately updating w and χ with a gradient-based method. Let us note that the results obtained by means of CSI

are of a quality comparable to that of the results displayed in [38] which have been obtained by means of a *modified gradient method* that is similar to CSI except that, at each iteration step, the contrast and the total field within the test domain are simultaneously updated.

CONCLUSION

We consider optical imaging as an inverse obstacle scattering problem which is known to be ill-posed. This means that a regularization of the problem is required prior to its resolution, and this regularization generally consists in introducing *a priori* information on the sought solution. Herein, such information is all the more necessary since aspect-limited data are considered which enhance the ill-posedness of the inverse problem. The latter consists in retrieving man-made objects that are known to be composed of a finite number of different materials, which constitutes an important prior knowledge. This means that the sought image is composed of a finite number of homogeneous regions. This prior knowledge is accounted for by means of a Gauss-Markov-Potts prior modelling of the contrast distribution developed in the Bayesian estimation framework.

The object studied herein is also known to be of high dielectric contrast which prevent us from using a Born-based linearized version of the inverse problem. So the latter is nonlinear and is derived from two coupled integral equations that link the measured scattered fields to the contrast sources induced within the object, both the contrast sources and the contrast being then considered as unknowns.

Good results have been obtained concerning the retrieved values of the contrast and the geometry of the object and it has been shown that the Bayesian approach developed herein performs better than deterministic iterative techniques such as the contrast source inversion and modified gradient methods. Furthermore, as compared to the latter, it has the advantage of providing not only an estimate of the contrast distribution but also its segmentation in regions and contrast parameters (means and variances) in each of the latter. In many applications, this latter information is even more important than the reconstruction itself.

Finally, while it minimizes the approximation error, the so-called *variational Bayesian approach* used herein allows a much faster approximation of the posterior laws of the unknowns than the traditional MCMC sampling method based upon a Gibbs sampling algorithm. This time saving is greatly appreciated in intricate configurations such as the one considered herein which concerns objects in stratified media and requires heavy computations.

ACKNOWLEDGEMENTS

The authors are grateful to G. Maire, A. Sentenac and K. Belkebir (Institut Fresnel, Marseille, France) for the experimental data.

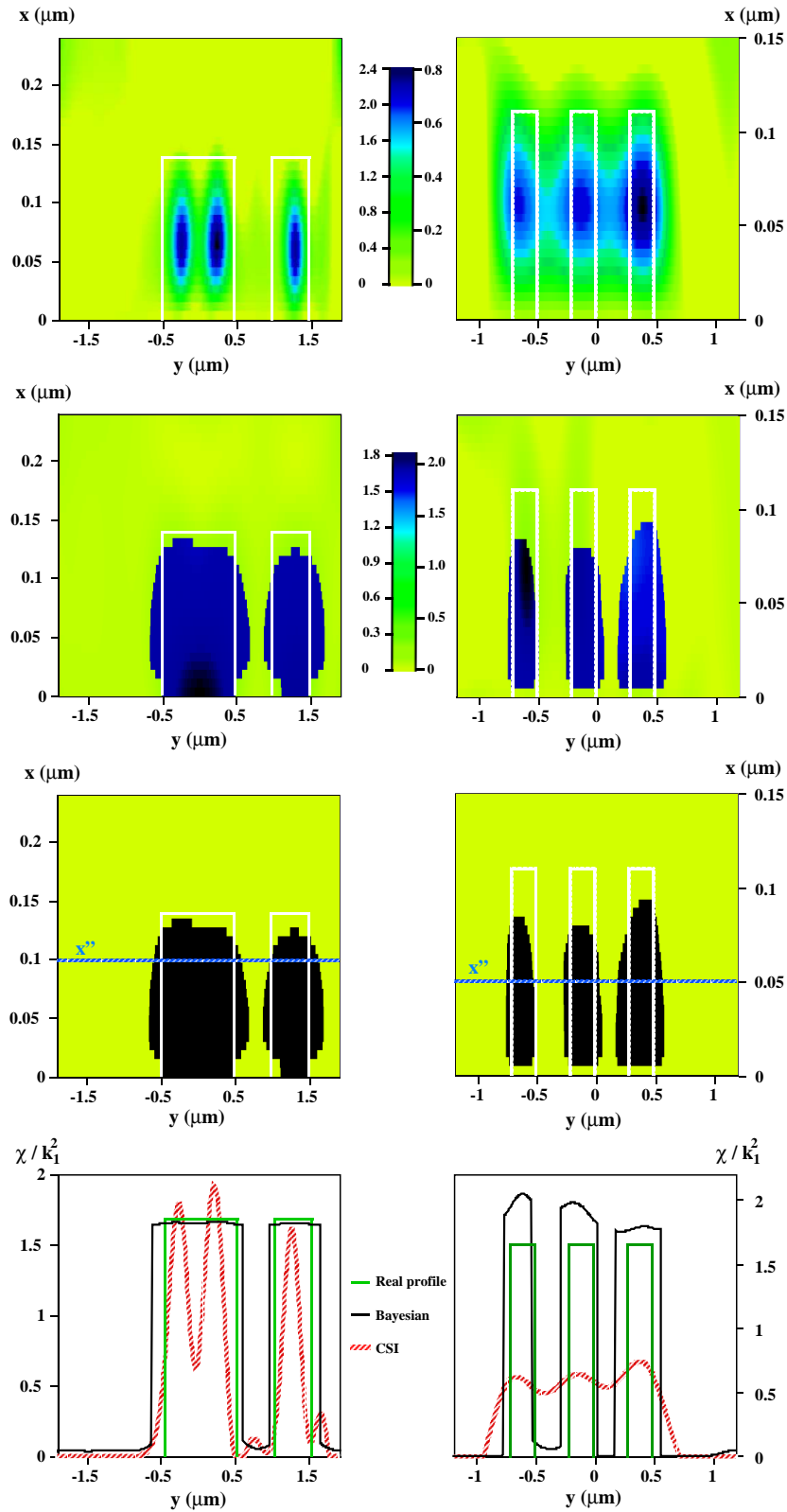


Figure 4. The results obtained for objects $\mathcal{O}1$ (left column) and $\mathcal{O}2$ (right column) of Figure 1: the normalized contrast (χ/k_1^2) retrieved by means of the contrast source inversion method (1st row) and by means of the proposed Bayesian approach (2nd row), the class (3rd row) and the normalized contrast profile retrieved at a height x'' ($x'' = 0.1 \mu\text{m}$ for $\mathcal{O}1$ and $x'' = 0.05 \mu\text{m}$ for $\mathcal{O}2$) (last row). The true profiles are indicated by white or green lines.

REFERENCES

- [1] S.R. Arridge, *Optical tomography in medical imaging*, Inverse Prob. 15 (1999), pp. R41–R93.
- [2] A. Schatzberg and A.J. Devaney, *Super-resolution in diffraction tomography*, Inverse Prob. 8 (1992), pp. 149–164.
- [3] M. Debailleul, B. Simon, V. Georges, O. Haeberlé, and V. Lauer, *Holographic microscopy and diffractive microtomography of transparent samples*, Meas. Sci. Technol. 19 (2008).
- [4] B. Simon, M. Debailleul, V. Georges, V. Lauer, and O. Haeberlé, *Tomographic diffractive microscopy of transparent samples*, Eur. Phys. J. Appl. Phys. 44 (2008), pp. 29–35.
- [5] M. Azimi and A. Kak, *Distortion in diffraction tomography caused by multiple scattering*, IEEE Trans. Med. Imaging MI-2 (1983), pp. 176–195.
- [6] M. Slaney, A. Kak, and L. Larsen, *Limitations of imaging with first-order diffraction tomography*, IEEE Trans. Microwave Theory Tech. MTT-32 (1984), pp. 860–874.
- [7] K. Belkebir and A. Sentenac, *High-resolution optical diffraction microscopy*, J. Opt. Soc. Am. A 20 (2003), pp. 1223–1229.
- [8] V. Lauer, *New approach to optical diffraction tomography yielding a vector equation of diffraction tomography and a novel tomographic microscope*, J. Microsc. 205 (2002), pp. 165–176.
- [9] J. Idier *Approche Bayésienne pour les Problèmes Inverses*, Hermès, Paris, 2001.
- [10] L. Tierney, *Markov chain for exploring posterior distribution*, Ann. Stat. 22 (1994), pp. 1701–1762.
- [11] W. Pieczynski, *Modèles de Markov en traitement d’images*, Traitement du Signal 20 (2003), pp. 255–278.
- [12] O. Féron and A. Mohammad-Djafari, *Image fusion and joint segmentation using an MCMC algorithm*, J. Electronic Imaging 14 (2002), pp. 1–12 ID: 023014.
- [13] O. Féron, B. Duchêne, and A. Mohammad-Djafari, *Microwave imaging of inhomogeneous objects made of a finite number of dielectric and conductive materials from experimental data*, Inverse Prob. 21 (2005), pp. S95–S115.
- [14] H. Ayasso, B. Duchêne, and A. Mohammad-Djafari, *Bayesian inversion for optical diffraction tomography*, J. Modern Opt., 57 (2010), pp. 765–776.
- [15] S. Geman and D. Geman, *Stochastic relaxation, Gibbs distribution and the Bayesian restoration of image*, IEEE Trans. Pattern Anal. Mach. Int. PAMI-6 (1984), pp. 721–41.
- [16] L. Tierney and J.B. Kadane, *Accurate approximations for posterior moments and marginal densities*, J. Amer. Statist. Ass. 81 (1986), pp. 82–86.
- [17] C. Robert and G. Casella *Monte Carlo Statistical Methods*, Springer Verlag, New York, 2004.
- [18] V. Smídl and A. Quinn *The Variational Bayes Method in Signal Processing*, Springer Verlag, Berlin, 2006.
- [19] G.E. Hinton and D. Campvan, *Keeping the neural networks simple by minimizing the description length of the weights*, in *Proc. 6th Conf. Computational Learning Theory* ACM New York, NY, USA, 1993, pp. 5–13.
- [20] D.J.C. MacKay, *Ensemble learning and evidence maximization*, in *Proc. NIPS*, 1995.
- [21] M.I. Jordan, Z. Ghahramani, T.S. Jaakkola, and L.K. Saul, *An Introduction to Variational Methods for Graphical Models*, Machine Learning 37 (1999), pp. 183–233.
- [22] T.S. Jaakkola and M.I. Jordan, *Bayesian parameter estimation via variational methods*, Statistics and Computing 10 (2000), pp. 25–37.
- [23] A.C. Likas and N.P. Galatsanos, *A variational approach for Bayesian blind image deconvolution*, IEEE Trans. Signal Processing, SP-52 (2004), pp. 2222–2233.
- [24] H. Ayasso and A. Mohammad-Djafari, *Joint NDT image restoration and segmentation using Gauss–Markov–Potts prior models and variational Bayesian computation*, IEEE Trans. Image Processing IP-19 (2010), pp. 2265–2277.
- [25] R. Choudrey, *Variational methods for Bayesian independent component analysis*, University of Oxford, 2002.
- [26] S. Kullback and R. Leibler, *On information and sufficiency*, Ann. Math. Stat. 22 (1951), pp. 79–87.
- [27] G. Maire, J. Girard, F. Drsek, H. Giovannini, A. Talneau, K. Belkebir, P.C. Chaumet, and A. Sentenac, *Experimental inversion of optical diffraction tomography data with a nonlinear algorithm in the multiple scattering regime*, J. Modern Opt., 57 (2010), pp. 746–755.
- [28] W. Chew *Waves and Fields in Inhomogeneous Media*, IEEE Press, New York, 1995.
- [29] D. Colton and R. Kress *Inverse Acoustic and Electromagnetic Scattering Theory*, Springer, New York, 1992.
- [30] D. Lesselier and B. Duchêne, *Buried, 2-D penetrable objects illuminated by line-sources: FFT-based iterative computations of the anomalous field*, in *Application of Conjugate Gradient Methods to Electromagnetics and Signal Analysis*, T.K. Sarkar ed., Elsevier, New York, 1991, pp. 400–438.
- [31] L. Souriau, B. Duchêne, D. Lesselier, and R.E. Kleinman, *A modified gradient approach to inverse scattering for binary objects in stratified media*, Inverse Prob. 12 (1996), pp. 463–481.
- [32] P.C. Clemmow *The Plane Wave Spectrum Representation of Electromagnetic Fields*, Pergamon Press, Oxford, 1966.
- [33] W.C. Gibson *The Method of Moments in Electromagnetics*, Chapman & Hall/CRC, Boca Raton, 2007.
- [34] T.K. Sarkar, E. Arvas, and S.M. Rao, *Conjugate gradient method for the solution of electromagnetic radiation from electrically large and small conducting bodies*, IEEE Trans. Antennas Propag. AP-34 (1986), pp. 635–640.
- [35] J. Richmond, *Scattering by a dielectric cylinder of arbitrary cross-section shape*, IEEE Trans. Antennas Propag. AP-13 (1965), pp. 334–341.
- [36] J.M. Bernardo and A.F.M. Smith *Bayesian Theory*, John Wiley and Sons, Chichester, 1994.

Inverse Problems in Science and Engineering

- [37] P.M. van den Berg and R.E. Kleinman, *A contrast source inversion method*, Inverse Prob. 13 (1997), pp. 1607–1620.
- [38] G. Maire, F. Drsek, J. Girard, H. Giovannini, A. Talneau, D. Konan, K. Belkebir, P.C. Chaumet, and A. Sentenac, *Experimental demonstration of quantitative imaging beyond Abbe's limit with optical diffraction tomography*, Phys. Rev. Lett. 102 (2009).

Papier III

Joint NDT Image Restoration and Segmentation
Using Gauss–Markov–Potts Prior Models and
Variational Bayesian Computation

Joint NDT Image Restoration and Segmentation Using Gauss–Markov–Potts Prior Models and Variational Bayesian Computation

Hacheme Ayasso, *Student Member, IEEE*, and Ali Mohammad-Djafari, *Member, IEEE*

Abstract—In this paper, we propose a method to simultaneously restore and to segment piecewise homogeneous images degraded by a known point spread function (PSF) and additive noise. For this purpose, we propose a family of nonhomogeneous Gauss–Markov fields with Potts region labels model for images to be used in a Bayesian estimation framework. The joint posterior law of all the unknowns (the unknown image, its segmentation (hidden variable) and all the hyperparameters) is approximated by a separable probability law via the variational Bayes technique. This approximation gives the possibility to obtain practically implemented joint restoration and segmentation algorithm. We will present some preliminary results and comparison with a MCMC Gibbs sampling based algorithm. We may note that the prior models proposed in this work are particularly appropriate for the images of the scenes or objects that are composed of a finite set of homogeneous materials. This is the case of many images obtained in nondestructive testing (NDT) applications.

Index Terms—Bayesian estimation, image restoration, segmentation, variational Bayes approximation.

I. INTRODUCTION

A simple direct model of image restoration problem is given by

$$g(\mathbf{r}) = h(\mathbf{r}) * f(\mathbf{r}) + \epsilon(\mathbf{r}) \longrightarrow \mathbf{g} = \mathbf{H}\mathbf{f} + \epsilon, \quad \mathbf{r} \in \mathcal{R} \quad (1)$$

where $g(\mathbf{r})$ is the observed image, $h(\mathbf{r})$ is a known point spread function, $f(\mathbf{r})$ is the unknown image, and $\epsilon(\mathbf{r})$ is the measurement error, and equivalently, \mathbf{g} , \mathbf{f} and ϵ are vectors containing samples of $g(\mathbf{r})$, $f(\mathbf{r})$, and $\epsilon(\mathbf{r})$, respectively, and \mathbf{H} is a huge matrix whose elements are determined using $h(\mathbf{r})$ samples. \mathcal{R} is the whole space of the image surface.

In a Bayesian framework for such an inverse problem, one starts by writing the expression of the posterior law

$$p(\mathbf{f}|\boldsymbol{\theta}, \mathbf{g}; \mathcal{M}) = \frac{p(\mathbf{g}|\mathbf{f}, \boldsymbol{\theta}_1; \mathcal{M})p(\mathbf{f}|\boldsymbol{\theta}_2; \mathcal{M})}{p(\mathbf{g}|\boldsymbol{\theta}; \mathcal{M})} \quad (2)$$

Manuscript received February 27, 2009; October 12, 2009; accepted March 09, 2010. First published April 08, 2010; current version published August 18, 2010. The associate editor coordinating the review of this manuscript and approving it for publication was Dr. Eero P. Simoncelli.

The authors are with Laboratoire des Signaux et Systèmes, Unité mixte de recherche 8506 (Univ Paris-Sud — CNRS — SUPELEC), Supélec, Plateau de Moulon, 91192 Gif-sur-Yvette, France (e-mail: ayasso@lss.supelec.fr).

Color versions of one or more of the figures in this paper are available online at <http://ieeexplore.ieee.org>.

Digital Object Identifier 10.1109/TIP.2010.2047902

where hyperparameters $\boldsymbol{\theta} = (\boldsymbol{\theta}_1, \boldsymbol{\theta}_2)$, $p(\mathbf{g}|\mathbf{f}, \boldsymbol{\theta}_1; \mathcal{M})$, called the *likelihood*, is obtained using the forward model (1) and the assigned probability law $p_\epsilon(\epsilon)$ of the errors, $p(\mathbf{f}|\boldsymbol{\theta}_2; \mathcal{M})$ is the assigned prior law for the unknown image \mathbf{f} and

$$p(\mathbf{g}|\boldsymbol{\theta}; \mathcal{M}) = \int p(\mathbf{g}|\mathbf{f}, \boldsymbol{\theta}_1; \mathcal{M})p(\mathbf{f}|\boldsymbol{\theta}_2; \mathcal{M})d\mathbf{f} \quad (3)$$

is the evidence of the model \mathcal{M} . Assigning Gaussian priors

$$p(\mathbf{g}|\mathbf{f}, \theta_\epsilon; \mathcal{M}) = \mathcal{N}(\mathbf{H}\mathbf{f}, (1/\theta_\epsilon)\mathbf{I}) \quad (4a)$$

$$p(\mathbf{f}|\theta_f; \mathcal{M}) = \mathcal{N}(\mathbf{0}, \Sigma_f)$$

$$\text{with } \Sigma_f = (1/\theta_f)(\mathbf{D}^T \mathbf{D})^{-1}. \quad (4b)$$

It is easy to show that the posterior law is also Gaussian

$$p(\mathbf{f}|\mathbf{g}, \theta_\epsilon, \theta_f; \mathcal{M}) \propto p(\mathbf{g}|\mathbf{f}, \theta_\epsilon; \mathcal{M})p(\mathbf{f}|\theta_f; \mathcal{M}) \\ = \mathcal{N}(\hat{\mathbf{f}}, \hat{\Sigma}_f) \quad (5a)$$

$$\text{with } \hat{\Sigma}_f = [\theta_\epsilon \mathbf{H}^T \mathbf{H} + \theta_f \mathbf{D}_f^T \mathbf{D}_f]^{-1} \\ = \frac{1}{\theta_\epsilon} [\mathbf{H}^T \mathbf{H} + \lambda \mathbf{D}^T \mathbf{D}]^{-1}, \quad \lambda = \frac{\theta_f}{\theta_\epsilon} \quad (5b)$$

$$\text{and } \hat{\mathbf{f}} = \theta_\epsilon \hat{\Sigma}_f \mathbf{H}^T \mathbf{g} \\ = [\mathbf{H}^T \mathbf{H} + \lambda \mathbf{D}^T \mathbf{D}]^{-1} \mathbf{H}^T \mathbf{g} \quad (5c)$$

which can also be obtained as the solution that minimizes

$$J_1(\mathbf{f}) = \|\mathbf{g} - \mathbf{H}\mathbf{f}\|^2 + \lambda \|\mathbf{D}\mathbf{f}\|^2 \quad (6)$$

where we can see the link with the classical regularization theory [1].

For more general cases, using the MAP estimate

$$\hat{\mathbf{f}} = \arg \max_{\mathbf{f}} \{p(\mathbf{f}|\boldsymbol{\theta}, \mathbf{g}; \mathcal{M})\} = \arg \min_{\mathbf{f}} \{J_1(\mathbf{f})\} \quad (7)$$

we have

$$J_1(\mathbf{f}) = -\ln p(\mathbf{g}|\mathbf{f}, \theta_\epsilon; \mathcal{M}) - \ln p(\mathbf{f}|\boldsymbol{\theta}_2; \mathcal{M}) \\ = \|\mathbf{g} - \mathbf{H}\mathbf{f}\|^2 + \lambda \Omega(\mathbf{f}) \quad (8)$$

where $\lambda = 1/\theta_\epsilon$ and $\Omega(\mathbf{f}) = -\ln p(\mathbf{f}|\boldsymbol{\theta}_2; \mathcal{M})$. Two families of priors could be distinguished

$$\text{Separable : } p(\mathbf{f}) \propto \exp \left[-\theta_f \sum_j \phi(f_j) \right]$$

and

$$\text{Markovian : } p(\mathbf{f}) \propto \exp \left[-\theta_f \sum_j \phi(f_j - f_{j-1}) \right]$$

where different expressions have been used for the potential function $\phi(\cdot)$, [2]–[4] with great success in many applications.

Still, this family of priors cannot give a precise model for the unknown image in many applications, due to the assumption of global homogeneity of the image. For this reason, we have chosen in this paper to use a nonhomogeneous prior model that takes into account the existence of contours in most the images. In particular, we aim to simultaneously obtain a restored image and its segmentation, which means that we are interested in images composed of finite number of homogeneous regions. This implies the introduction of the hidden variable $\mathbf{z} = \{z(\mathbf{r}), \mathbf{r} \in \mathcal{R}\}$ which associates each pixel $f(\mathbf{r})$ with a label (class) $z(\mathbf{r}) \in \{1, \dots, K\}$, where K is the number of classes and \mathcal{R} represents the whole space of the image surface. All pixels with the same label $z(\mathbf{r}) = k$ share some properties, for example the mean gray level, the mean variance, and the same correlation structure. Indeed, we use a Potts-Markov model for the hidden label variance $z(\mathbf{r})$ to model the spatial structure of the regions. As we will see later, the parameters of these models can control the mean size of the regions in the image. Even if we assume that the pixels inside a region are mutually independent of those of other regions, for the pixels inside a given region we propose two models: independent or Markovian, i.e. the image \mathbf{f} is modeled as a mixture of independent Gaussians or a mixture of multivariate (Gauss–Markov). However, this choice of prior makes it impossible to get an analytical expression for the maximum a posteriori (MAP) or posterior mean (PM) estimators. Consequently, we will use the variational Bayes technique to calculate an approximate form of this law.

The problem of image deconvolution in general and in a Bayesian framework has been widely discussed in [2], [3], [5], [6]. We present here the main contributions to this problem knowing that this list is far from being exhaustive. For example, from the point of view of prior choice, [7] used a Gaussian prior to restore the image. More sophisticated prior was proposed in [8] and [9] by means of Markov random fields. The choice of non quadratic potentials was studied by [10]–[12]. In a multiresolution context, we take the example of [13] and [14] where several priors were employed in the wavelet domain.

From the posterior approximation point of view, the Variational Bayes technique (or ensemble learning) was first introduced for neural networks application [15], [16]. Then it was applied to graphical model learning in [17] where several priors were studied. In [18], studied model parameter estimation in a Variational Bayes context with a Gaussian prior over these parameters was studied. However, more work related to this subject can be found in Section IV-B and [19].

The Variational Bayes technique was introduced for image recovery problems in [20]. Since then it has found a number of applications in this field. Smooth Gaussian priors were implemented for blind image deconvolution in [21]. An extension with a hierarchical model was proposed in [22]. Nonsmooth

based upon total variation (TV) and products of Student's-t priors for image restoration were used in [23] and [24], respectively. For blind image deconvolution using nonsmooth prior the variational approximation was used in [25] where a TV-based prior was used for the image and a Gaussian for the point-spread function (PSF) and in [26] where a Student's-t prior was used for the image and a kernel based Student's-t prior for the PSF.

The rest of this paper is organized as follows. In Section II, we give more details about the proposed prior models. In Section III, we employ these priors using the Bayesian framework to obtain a joint posterior law of the unknowns (image pixels, hidden variable, and the hyperparameters including the region statistical parameters and the noise variance). Then in Section IV, we use the variational Bayes approximation in order to obtain a tractable approximation of joint posterior law. In Section V, we show some image restoration examples. Finally, in Section VI we provide our conclusion for this work.

II. PROPOSED GAUSS–MARKOV–POTTS PRIOR MODELS

As presented in the previous section, the main assumption used here is the piecewise homogeneity of the restored image. This model corresponds to a number of applications where the studied data are obtained by imaging objects composed of a finite number of materials. This is the case of medical imaging (muscle and bone or grey-white materials). Indeed in nondestructive testing (NDT) imaging for industrial applications, studied materials are, in general, composed of air-metal or air-metal-composite. This prior model have already been used in several works for several application [27]–[30].

In fact, this assumption permits to associate a label (class) $z(\mathbf{r})$ to each pixel of the image \mathbf{f} . The set of these labels $\mathbf{z} \in \{z(\mathbf{r}), \mathbf{r} \in \mathcal{R}\}$ form a K color image, where K corresponds to the number of materials, and \mathcal{R} represents the entire image pixel area. This discrete value hidden variables field represents the segmentation of the image.

Moreover, all pixels $\mathbf{f}_k = \{f(\mathbf{r}), \mathbf{r} \in \mathcal{R}_k\}$ which have the same label k , share the same probabilistic parameters (class means μ_k , and class variances v_k), $\bigcup_k \mathcal{R}_k = \mathcal{R}$. Indeed, these pixels have a similar spatial structure while we assume here that pixels from different classes are *a priori* independent, which is natural since they image different materials. This will be a key hypothesis when introducing Gauss–Markov prior model of source later in this section.

Consequently, we can give the prior probability law of a pixel, given the class it belongs to, as a Gaussian (homogeneity inside the same class)

$$p(f(\mathbf{r})|z(\mathbf{r}) = k, m_k, v_k) = \mathcal{N}(m_k, v_k). \quad (9)$$

This will give a Mixture of Gaussians (MoG) model for the pixel $p(f(\mathbf{r}))$, which can be written as follows:

$$p(f(\mathbf{r})) = \sum_k \zeta_k \mathcal{N}(m_k, v_k) \quad \text{with} \quad \zeta_k = P(z(\mathbf{r}) = k). \quad (10)$$

Modeling the spatial interactions between different elements of the prior model is an important issue. This study is concerned with two interactions, pixels of images within the same

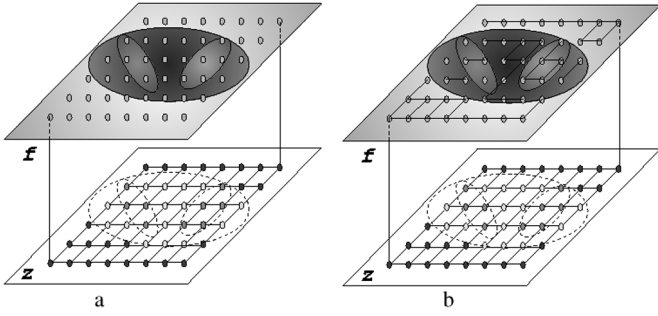


Fig. 1. Proposed *a priori* model for the images: the image pixels $f(\mathbf{r})$ are assumed to be classified in K classes, $z(\mathbf{r})$ represents those classes (segmentation). In MIG prior (a), we assume the image pixels in each class to be independent while in MGM prior (b), image pixels these are considered dependent. In both cases, the hidden field values follows Potts model.

class $\mathbf{f} = \{f(\mathbf{r}), \mathbf{r} \in \mathcal{R}\}$ and elements of the hidden variables $\mathbf{z} = \{z(\mathbf{r}), \mathbf{r} \in \mathcal{R}\}$. In this paper, we assign Potts model for the hidden field \mathbf{z} in order to obtain more homogeneous classes in the image. Meanwhile, we present two models for the image pixels \mathbf{f} ; the first is independent, while the second is a Gauss–Markov model. In the following, we give the prior probability of the image pixels and the hidden field elements for the two models.

A. Mixture of Independent Gaussians (MIG)

In this case, no prior dependence is assumed for the elements of \mathbf{f} given \mathbf{z}

$$p(f(\mathbf{r})|z(\mathbf{r}) = k) = \mathcal{N}(m_k, v_k), \quad \forall \mathbf{r} \in \mathcal{R} \quad (11a)$$

$$p(\mathbf{f}|\mathbf{z}, m_z(\mathbf{r}), v_z(\mathbf{r})) = \prod_{\mathbf{r} \in \mathcal{R}} \mathcal{N}(m_z(\mathbf{r}), v_z(\mathbf{r})) \quad (11b)$$

with $m_z(\mathbf{r}) = m_k, \forall \mathbf{r} \in \mathcal{R}_k, v_z(\mathbf{r}) = v_k, \forall \mathbf{r} \in \mathcal{R}_k$, and

$$\begin{aligned} p(\mathbf{f}|\mathbf{z}, \mathbf{m}, \mathbf{v}) &\propto \prod_{\mathbf{r} \in \mathcal{R}} \mathcal{N}(m_z(\mathbf{r}), v_z(\mathbf{r})) \\ &\propto \exp \left[-\frac{1}{2} \sum_{\mathbf{r} \in \mathcal{R}} \frac{(f(\mathbf{r}) - m_z(\mathbf{r}))^2}{v_z(\mathbf{r})} \right] \\ &\propto \exp \left[-\frac{1}{2} \sum_k \sum_{\mathbf{r} \in \mathcal{R}_k} \frac{(f(\mathbf{r}) - m_k)^2}{v_k} \right]. \end{aligned} \quad (12)$$

B. Mixture of Gauss–Markovs (MGM)

In the MIG model, the pixels of the image in different regions are assumed independent. Furthermore, all the pixels inside a region are also assumed conditionally independent. Here, we relax this last assumption by considering the pixels in a region Markovian with the four nearest neighbors

$$\begin{aligned} p(\mathbf{f}|\mathbf{z}) &= \frac{1}{Z_f} \prod_{\mathbf{r} \in \mathcal{R}} \Upsilon(f(\mathbf{r})|z(\mathbf{r}) = k, f(\mathbf{r}'), z(\mathbf{r}'), \mathbf{r}' \in \mathcal{V}_{\mathbf{r}}) \end{aligned} \quad (13)$$

$$\begin{aligned} \Upsilon(f(\mathbf{r})|z(\mathbf{r}) = k, f(\mathbf{r}'), z(\mathbf{r}'), \mathbf{r}' \in \mathcal{V}_{\mathbf{r}}) &= \mathcal{N}(\mu_k(\mathbf{r}), v_k(\mathbf{r})) \end{aligned} \quad (14)$$

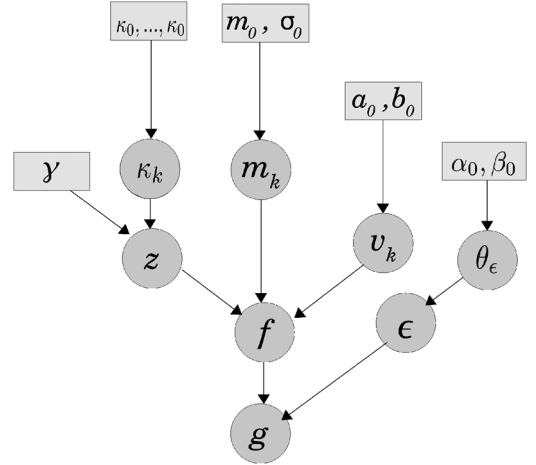


Fig. 2. Hierarchical prior model where our variable of interest \mathbf{f} can be modeled by a mixture of Gaussians (MIG) or mixture of Gauss–Markov (MGM) with mean values \mathbf{m} and variances \mathbf{v} . Hidden field \mathbf{z} prior follows an external field Potts model with κ and γ as hyperparameters. Meanwhile, the error prior is supposed Gaussian with unknown variance θ_ϵ^{-1} . Conjugate priors were chosen for $\mathbf{m}, \mathbf{v}, \kappa, \theta_\epsilon$, while γ is chosen as a fixed value.

with

$$\mu_k(\mathbf{r}) = \begin{cases} m_k & \text{if } \mathcal{C}(\mathbf{r}) = 1 \\ \frac{1}{|\mathcal{V}(\mathbf{r})|} \sum_{\mathbf{r}' \in \mathcal{V}(\mathbf{r})} f(\mathbf{r}') & \text{if } \mathcal{C}(\mathbf{r}) = 0 \end{cases} \quad (15)$$

$$\begin{aligned} v_k(\mathbf{r}) &= v_k \quad \forall \mathbf{r} \in \mathcal{R}_k \\ \mathcal{C}(\mathbf{r}) &= 1 - \prod_{\mathbf{r}' \in \mathcal{V}(\mathbf{r})} \delta(z(\mathbf{r}') - z(\mathbf{r})). \end{aligned} \quad (16)$$

We may remark that $\mathbf{f}|\mathbf{z}$ is a non homogeneous Gauss–Markov field because the means $\mu_k(\mathbf{r})$ are functions of the pixel position \mathbf{r} . As a by product, note that $\mathcal{C}(\mathbf{r})$ represents the contours of the image $\mathcal{C}(\mathbf{r}) = 1$ if $z(\mathbf{r}') \neq z(\mathbf{r})$ and $\mathcal{C}(\mathbf{r}) = 0$ elsewhere.

For both cases, a Potts Markov model will be used to describe the hidden field prior law for both image models

$$p(\mathbf{z}|\gamma) \propto \exp \left[\sum_{\mathbf{r} \in \mathcal{R}} \left(\Phi(z(\mathbf{r})) + \frac{\gamma}{2} \sum_{\mathbf{r}' \in \mathcal{V}_{\mathbf{r}}} \delta(z(\mathbf{r}) - z(\mathbf{r}')) \right) \right] \quad (17)$$

where $\Phi(z(\mathbf{r}))$ is the energy of singleton cliques, and γ is Potts constant. The hyperparameters of the model are class means m_k , variances v_k , and finally singleton clique energy $\ln \kappa_k = \Phi(k)$. The graphical model of the observation generation mechanism assumed here is given in Fig. 2.

III. BAYESIAN RECONSTRUCTION AND SEGMENTATION

So far, we have presented two prior models for the unknown image based upon the assumption that the object is composed of a known number of materials. That led us to the introduction of a hidden field, which assigns each pixel to a label corresponding to its material. Thus, each material can be characterized by the statistical properties (m_k, v_k, κ_k) . Now in order to estimate the

unknown image and its hidden field, we use the joint posterior law

$$p(\mathbf{f}, \mathbf{z} | \boldsymbol{\theta}, \mathbf{g}; \mathcal{M}) = \frac{p(\mathbf{g} | \mathbf{f}, \boldsymbol{\theta}_1) p(\mathbf{f} | \mathbf{z}, \boldsymbol{\theta}_2) p(\mathbf{z} | \boldsymbol{\theta}_3)}{p(\mathbf{g} | \boldsymbol{\theta})}. \quad (18)$$

This requires the knowledge of $p(\mathbf{f} | \mathbf{z}, \boldsymbol{\theta}_2)$, and $p(\mathbf{z} | \boldsymbol{\theta}_3)$ which we have already provided in the previous section, and the model likelihood $p(\mathbf{g} | \mathbf{f}, \boldsymbol{\theta}_1)$ which depends on the error model. Classically, it is chosen as a zero mean Gaussian with variance θ_ϵ^{-1} , which is given by

$$p(\mathbf{g} | \mathbf{f}, \theta_\epsilon) = \mathcal{N}(\mathbf{H}\mathbf{f}, \theta_\epsilon^{-1} \mathbf{I}). \quad (19)$$

In fact the previous calculation assumes that the hyperparameters values are known, which is not the case in many practical applications. Consequently, these parameters have to be estimated jointly with the unknown image. This is possible using the Bayesian framework. We need to assign a prior model for each hyperparameter and write the joint posterior law

$$p(\mathbf{f}, \mathbf{z}, \boldsymbol{\theta} | \mathbf{g}; \mathcal{M}) \propto p(\mathbf{g} | \mathbf{f}, \boldsymbol{\theta}_1; \mathcal{M}) p(\mathbf{f} | \mathbf{z}, \boldsymbol{\theta}_2; \mathcal{M}) \times p(\mathbf{z} | \boldsymbol{\theta}_3; \mathcal{M}) p(\boldsymbol{\theta} | \mathcal{M}) \quad (20)$$

where $\boldsymbol{\theta} = \{\theta_1, \theta_2, \theta_3\}$ groups all the unknown hyperparameters, which are the means m_k , the variances v_k , the singleton energy κ_k , and error inverse variance θ_ϵ . While, the Potts constant γ is chosen to be fixed due to the difficulty of finding a conjugate prior to it. We choose an Inverse Gamma for the model of the error variance θ_ϵ , a Gaussian for the means m_k , an Inverse Gamma for the variances v_k , and finally a Dirichlet for κ_k

$$p(\theta_\epsilon | \alpha_0, \beta_0) = \mathcal{G}(\alpha_0, \beta_0), \quad \forall k \quad (21a)$$

$$p(m_k | m_0, \sigma_0) = \mathcal{N}(m_0, \sigma_0), \quad \forall k \quad (21b)$$

$$p(v_k^{-1} | a_0, b_0) = \mathcal{G}(a_0, b_0), \quad \forall k \quad (21c)$$

$$p(\boldsymbol{\kappa} | \kappa_0) = \mathcal{D}(\kappa_0, \dots, \kappa_0) \quad (21d)$$

where $\alpha_0, \beta_0, m_0, \sigma_0, a_0, b_0$, and κ_0 are fixed for a given problem. The previous choice of conjugate priors is very helpful for the calculation that follows in the next section.

IV. BAYESIAN COMPUTATION

In the previous section, we found the necessary ingredients to obtain the expression of the joint posterior law. However, calculating the joint maximum posterior (JMAP) $(\hat{\mathbf{f}}, \hat{\mathbf{z}}, \hat{\boldsymbol{\theta}}) = \arg \max_{(\mathbf{f}, \mathbf{z}, \boldsymbol{\theta})} p(\mathbf{f}, \mathbf{z}, \boldsymbol{\theta} | \mathbf{g}; \mathcal{M})$ or the posterior means (PM)

$$\hat{\mathbf{f}} = \sum_{\mathbf{z}} \int \int \mathbf{f} p(\mathbf{f}, \mathbf{z}, \boldsymbol{\theta} | \mathbf{g}; \mathcal{M}) d\mathbf{f} d\boldsymbol{\theta}$$

$$\hat{\boldsymbol{\theta}} = \sum_{\mathbf{z}} \int \int \boldsymbol{\theta} p(\mathbf{f}, \mathbf{z}, \boldsymbol{\theta} | \mathbf{g}; \mathcal{M}) d\mathbf{f} d\boldsymbol{\theta}$$

and

$$\hat{\mathbf{z}} = \sum_{\mathbf{z}} \int \int \mathbf{z} p(\mathbf{f}, \mathbf{z}, \boldsymbol{\theta} | \mathbf{g}; \mathcal{M}) d\mathbf{f} d\boldsymbol{\theta}$$

can not be obtained in an analytical form. Therefore, we explore two approaches to solve this problem. The first is the Monte Carlo technique and the second is Variational Bayes approximation.

A. Numerical Exploration and Integration via Monte Carlo Techniques

This method solves the previous problem by generating a great number of samples representing the posterior law and then calculating the desired estimators numerically from these samples. The main difficulty comes from the generation of these samples. Markov Chain Monte Carlo (MCMC) samplers are used generally in this domain and they are of great interest because they explore the entire space of the probability density. The major drawback of this nonparametric approach is the computational cost. A great number of iterations are needed to reach the convergence; also many samples are required to obtain good estimates of the parameters.

To apply this method to our problem, we use a Gibbs sampler. The basic idea in this approach is to generate samples from the posterior law (20) using the following general algorithm:

$$\mathbf{f} \sim p(\mathbf{f} | \mathbf{z}, \boldsymbol{\theta}, \mathbf{g}; \mathcal{M}) \propto p(\mathbf{g} | \mathbf{f}, \boldsymbol{\theta}_1; \mathcal{M}) p(\mathbf{f} | \mathbf{z}, \boldsymbol{\theta}_2; \mathcal{M}) \quad (22a)$$

$$\mathbf{z} \sim p(\mathbf{z} | \mathbf{f}, \boldsymbol{\theta}, \mathbf{g}; \mathcal{M}) \propto p(\mathbf{f} | \mathbf{z}, \boldsymbol{\theta}_2; \mathcal{M}) p(\mathbf{z} | \boldsymbol{\theta}_3; \mathcal{M}) \quad (22b)$$

and

$$\boldsymbol{\theta} \sim p(\boldsymbol{\theta} | \mathbf{f}, \mathbf{z}, \mathbf{g}; \mathcal{M}) \propto p(\mathbf{f} | \mathbf{z}, \boldsymbol{\theta}_2; \mathcal{M}) p(\boldsymbol{\theta} | \mathcal{M}). \quad (22c)$$

We have the expressions for all the necessary probability laws in the right hand side of the previously mentioned three conditional laws to be able to sample from them. Indeed, it is easy to show that the first one $p(\mathbf{f} | \mathbf{z}, \boldsymbol{\theta}, \mathbf{g}; \mathcal{M})$ is a Gaussian which is then easy to handle. The second $p(\mathbf{z} | \mathbf{f}, \boldsymbol{\theta}, \mathbf{g}; \mathcal{M})$ is a Potts field where many fast methods exist to generate samples from it [31]. The last one $p(\boldsymbol{\theta} | \mathbf{f}, \mathbf{z}, \mathbf{g}; \mathcal{M})$ is also separable in its components, and due to the conjugate property, it is easy to see that the posterior laws are either Inverse Gamma, Inverse Wishart, Gaussian, and Dirichlet for which there are standard sampling schemes [28], [32].

B. Variational or Separable Approximation Techniques

One of the main difficulties to obtain an analytical expression for the estimator is the posterior dependence between the unknown parameters. For this reason, we propose, for this method, a separable form of the joint posterior law, and then we try to find the closest posterior to the original posterior under this constraint. The idea of approximating a joint probability law $p(\mathbf{x})$ by a separable law $q(\mathbf{x}) = \prod_j q_j(x_j)$ is not new [33]–[36]. The selection of the parametric families of $q_j(x_j)$ for which the computations can be easily done has been addressed recently for data mining and classification problems [37]–[44], and [40]. However, their use for Bayesian computations for the inverse problems in general and for image restoration in particular, using this class of prior models, is one of the contributions.

We consider the problem of approximating a joint pdf $p(\mathbf{x} | \mathcal{M})$ by a separable one $q(\mathbf{x}) = \prod_j q_j(x_j)$. The first

step for this approximation is to choose a criterion. A natural criterion is the Kullback–Leibler divergence

$$\begin{aligned} \text{KL}(q : p) &= \int q(\mathbf{x}) \ln \frac{q(\mathbf{x})}{p(\mathbf{x}|\mathcal{M})} d\mathbf{x} \\ &= -\mathcal{H}(q) - \langle \ln p(\mathbf{x}|\mathcal{M}) \rangle_{q(\mathbf{x})} \\ &= -\sum_j \mathcal{H}(q_j) - \langle \ln p(\mathbf{x}|\mathcal{M}) \rangle_{q(\mathbf{x})} \end{aligned} \quad (23)$$

where $\langle p \rangle_q$ is the expectation of p w.r.t q . So, the main mathematical problem is finding $\hat{q}(\mathbf{x})$ which minimizes $\text{KL}(q : p)$.

We first make two points:

- 1) the optimal solution without any constraint is the trivial solution $\hat{q}(\mathbf{x}) = p(\mathbf{x})$;
- 2) the optimal solution with the constraint $\langle \ln p(\mathbf{x}|\mathcal{M}) \rangle_{q(\mathbf{x})} = c$ where c is a given constant is the one which maximizes the entropy $\mathcal{H}(q)$ and is given by using the properties of the exponential family. This functional optimization problem can be solved and the general solution is

$$q_j(x_j) = \frac{1}{C_j} \exp \left[-\langle \ln p(\mathbf{x}|\mathcal{M}) \rangle_{q_{-j}} \right] \quad (24)$$

where $q_{-j} = \prod_{i \neq j} q_i(x_i)$ and C_j are the normalizing factors [16], [45].

However, we may note that, first the expression of $q_j(x_j)$ depends on the expressions of $q_i(x_i)$, $i \neq j$. Thus, this computation can be done only in an iterative way. The second point is that in order to compute these solutions we must compute $\langle \ln p(\mathbf{x}|\mathcal{M}) \rangle_{q_{-j}}$. The only families for which these computations are easily done are the conjugate exponential families. At this point, we see the importance of our choice of priors in the previous section.

The first step is to choose a separable form that is appropriate for our problem. In fact there is no rule for choosing the appropriate separation; nevertheless, this choice must conserve the strong dependences between variables and break the weak ones, keeping in mind the computation complexity of the posterior law. In this work, we propose a strongly separated posterior, where only dependence between image pixels and hidden fields is conserved. This posterior is given by

$$q(\mathbf{f}, \mathbf{z}, \boldsymbol{\theta}) = \prod_{\mathbf{r}} [q(\mathbf{f}(\mathbf{r})|\mathbf{z}(\mathbf{r}))] \prod_{\mathbf{r}} [q(\mathbf{z}(\mathbf{r}))] \prod_l q(\boldsymbol{\theta}_l). \quad (25)$$

Applying the approximated posterior expression (24) on $p(\mathbf{f}, \mathbf{z}, \boldsymbol{\theta}|\mathbf{g}; \mathcal{M})$, we see that the optimal solution for $q(\mathbf{f}, \mathbf{z}, \boldsymbol{\theta})$ has the following form:

$$q(\mathbf{f}|\mathbf{z}) = \prod_k \prod_{\mathbf{r} \in \mathcal{R}_k} \mathcal{N}(\tilde{\mu}_k(\mathbf{r}), \tilde{v}_k(\mathbf{r})) \quad (26a)$$

$$q(\mathbf{z}) = \prod_{\mathbf{r}} q(\mathbf{z}(\mathbf{r})|\tilde{z}(\mathbf{r}'), \mathbf{r}' \in \mathcal{V}(\mathbf{r})) \quad (26b)$$

$$q(\mathbf{z}(\mathbf{r})=k|\tilde{z}(\mathbf{r}')) = \tilde{\zeta}_k(\mathbf{r}) \propto \tilde{c}_k \tilde{d}_k(\mathbf{r}) \tilde{e}_k(\mathbf{r}) \quad (26c)$$

$$q(\theta_\epsilon|\tilde{\alpha}, \tilde{\beta}) = \mathcal{G}(\tilde{\alpha}, \tilde{\beta}), \quad (26d)$$

$$q(m_k|\tilde{m}_k, \tilde{\sigma}_k) = \mathcal{N}(\tilde{m}_k, \tilde{\sigma}_k), \quad \forall k \quad (26e)$$

$$q(v_k^{-1}|\tilde{a}_k, \tilde{b}_k) = \mathcal{G}(\tilde{a}_k, \tilde{b}_k), \quad \forall k \quad (26f)$$

$$q(\boldsymbol{\kappa}) = \mathcal{D}(\tilde{\kappa}_1, \dots, \tilde{\kappa}_K) \quad (26g)$$

where the shaping parameters of these laws are mutually dependent. So, an iterative method should be applied to obtain the optimal values. In the following, we will give the expression of each shaping parameter for the iteration t as function of the previous iteration $t-1$.

We can unify both priors by means of contour variable \mathcal{C} which is set to 1 in the MIG prior and the value defined in (16) in the MGM case.

We start by the conditional posterior of the image $q(\mathbf{f}|\mathbf{z})$ in (26a) where $\tilde{\mu}_k^t(\mathbf{r})$ and $\tilde{v}_k^t(\mathbf{r})$ are given by the following relations:

$$\begin{aligned} \tilde{\mu}_k^t(\mathbf{r}) &= \tilde{f}^{t-1}(\mathbf{r}) + \tilde{v}_k^t(\mathbf{r}) \\ &\quad \left[\frac{(\tilde{\mu}_k^{*t-1}(\mathbf{r}) - \tilde{f}^{t-1}(\mathbf{r}))}{\tilde{v}_k^{t-1}} + \bar{\theta}_\epsilon^{t-1} \sum_{\mathbf{s}} H(\mathbf{s}, \mathbf{r}) (g(\mathbf{s}) - \tilde{g}^{t-1}(\mathbf{s})) \right] \end{aligned} \quad (27a)$$

$$\tilde{\mu}_k^t(\mathbf{r}) = \begin{cases} \tilde{m}_k^t & \text{MIG} \\ \frac{1 - \tilde{C}_k^t(\mathbf{r})}{|\mathcal{V}(\mathbf{r})|} \sum_{\mathbf{r}'} \tilde{\mu}_k^t(\mathbf{r}') \\ + \tilde{C}_k^t(\mathbf{r}) \tilde{m}_k^t, & \text{MGM} \end{cases} \quad (27b)$$

$$\tilde{c}_k^t(\mathbf{r}) = \begin{cases} 1 & \text{MIG case} \\ 1 - \prod_{\mathbf{r}' \in \mathcal{V}(\mathbf{r})} \tilde{c}_k(\mathbf{r}'), & \text{MGM case} \end{cases} \quad (27c)$$

$$\tilde{v}_k^t(\mathbf{r}) = \frac{\tilde{v}_k^{t-1}}{(1 + \tilde{v}_k^{t-1} \bar{\theta}_\epsilon^{t-1} \sum_{\mathbf{s}} H^2(\mathbf{s}, \mathbf{r}))} \quad (27d)$$

$$\tilde{v}_k^{t-1} = \langle v_k \rangle_{q^{t-1}} = (\tilde{a}_k^{t-1} \tilde{b}_k^{t-1})^{-1} \quad (27e)$$

$$\bar{\theta}_\epsilon^{t-1} = \langle \theta_\epsilon \rangle_{q^{t-1}} = (\tilde{\alpha}^{t-1} \tilde{\beta}^{t-1})^{-1} \quad (27f)$$

$$\tilde{f}^t(\mathbf{r}) = \sum_k \tilde{c}_k^t(\mathbf{r}) \tilde{\mu}_k^t(\mathbf{r}) \quad (27g)$$

$$\tilde{g}^t(\mathbf{s}) = [\mathcal{H}\mathbf{f}](\mathbf{s}) = \sum_{\mathbf{r}} H(\mathbf{s}, \mathbf{r}) \tilde{f}^t(\mathbf{r}). \quad (27h)$$

The expression for \tilde{a}_k^t , \tilde{b}_k^t , $\tilde{\alpha}^t$, and $\tilde{\beta}^t$ are given later in (29). The expression for \tilde{c}_k^t , \tilde{d}_k and \tilde{e}_k of the posterior law of the hidden field $q(\mathbf{z})$ in (26c) are given by the following relations:

$$\begin{aligned} \tilde{c}_k^t &= \sqrt{\tilde{a}_k^{t-1}} \exp \left[\Psi(\tilde{\kappa}_k^{t-1}) \right. \\ &\quad \left. - \Psi \left(\sum_l \tilde{\kappa}_l^{t-1} \right) + \frac{\Psi(\tilde{b}_k^{t-1})}{2} \right] \end{aligned} \quad (28a)$$

$$\begin{aligned} \tilde{d}_k^t(\mathbf{r}) &= \sqrt{(\tilde{v}_k^t(\mathbf{r}))^{-1}} \\ &\quad \times \exp \left[-\frac{1}{2} \left(\frac{(\tilde{\mu}_k^t(\mathbf{r}) - \tilde{\mu}_k^{t-1}(\mathbf{r}))^2}{\tilde{v}_k^t(\mathbf{r})} - \frac{(\tilde{\mu}_k^t(\mathbf{r}))^2}{\tilde{v}_k^t(\mathbf{r})} \right. \right. \\ &\quad \left. \left. + \frac{\langle (\mu_k(\mathbf{r}))^2 \rangle_{q^{t-1}}}{\tilde{v}_k^{t-1}} \right) \right] \end{aligned} \quad (28b)$$

$$\tilde{e}_k^t(\mathbf{r}) = \exp \left[+\frac{1}{2} \gamma \sum_{\mathbf{r}'} \tilde{c}_k^{t-1}(\mathbf{r}') \right]. \quad (28c)$$

TABLE I
HYPER-HYPERPARAMETERS VALUES

m_0	σ_0	a_0	b_0	α_0	β_0	κ_0	γ
0.5	1	100	10^{-3}	10	10^{-3}	5	5

TABLE II
MODEL GENERATED IMAGE PROPERTIES MIG

	Size(f)	K	m	$v \times 10^{-5}$	Size(H)	θ_ϵ
MIG	128×128	2	(0,1)	(1,10)	9×9	100
MGM	128×128	2	(0,1)	(100,100)	9×9	100

Finally, the hyperparameters posterior parameters in (26) are

$$\hat{\alpha}^t = \left[\alpha_0^{-1} + \frac{1}{2} \sum_{\mathbf{r}} \left\langle (g(\mathbf{r}) - [\mathcal{H}\mathbf{f}](\mathbf{r}))^2 \right\rangle_{q^{t-1}} \right]^{-1} \quad (29a)$$

$$\hat{\beta}^t = b_0 + \frac{|\mathcal{R}|}{2} \quad (29b)$$

$$\hat{m}_k^t = \hat{\sigma}_k^t \left(\frac{m_0}{\sigma_0} + \frac{1}{\hat{v}_k^{t-1}} \sum_{\mathbf{r}} \hat{C}_k^{t-1}(\mathbf{r}) \hat{\zeta}_k^{t-1}(\mathbf{r}) \hat{\mu}_k^{t-1}(\mathbf{r}) \right) \quad (29c)$$

$$\hat{\sigma}_k^t = \left(\sigma_0^{-1} + \frac{1}{\hat{v}_k^{t-1}} \sum_{\mathbf{r}} \hat{C}_k^{t-1}(\mathbf{r}) \hat{\zeta}_k^{t-1}(\mathbf{r}) \right)^{-1} \quad (29d)$$

$$\hat{a}_k^t = \left[a_0^{-1} + \frac{1}{2} \sum_{\mathbf{r}} \left\langle (f(\mathbf{r}) - \mu_k(\mathbf{r}))^2 \right\rangle_{q^{t-1}} \right]^{-1} \quad (29e)$$

$$\hat{b}_k^t = b_0 + \frac{1}{2} \sum_{\mathbf{r}} \hat{\zeta}_k^{t-1}(\mathbf{r}) \quad (29f)$$

$$\hat{\kappa}_k^t = \kappa_0 + \sum_{\mathbf{r}} \hat{\zeta}_k^{t-1}(\mathbf{r}). \quad (29g)$$

Several observations can be made for these results. The most important is that the problem of probability law optimization turned into simple parametric computation, which reduces significantly the computational burden. Indeed, although for our choice of a strong separation, posterior mean value dependence between image pixels and hidden field elements is present in the equations, which justifies the use of spatially dependent prior model with this independent approximated posterior. On the other hand, the iterative nature of the solution requires a choice of a stopping criterion. We have chosen to use the variation of the negative free energy

$$\mathcal{F}(\mathbf{g}) = \langle \ln(p(\mathbf{g}, \mathbf{f}, \mathbf{z}, \boldsymbol{\theta})) \rangle_{q(\mathbf{f}, \mathbf{z}, \boldsymbol{\theta})} + \mathcal{H}(q(\mathbf{f}, \mathbf{z}, \boldsymbol{\theta})) \quad (30)$$

to decided the convergence of the variables. This seems natural since it can be expressed as the difference between Kullback–Leibler divergence and the log-evidence of the model

$$\mathcal{F}(\mathbf{g}) = KL(q : p) + \ln(p(\mathbf{g}|\mathcal{M})). \quad (31)$$

We can find the expression of the free energy using the shaping parameters calculated previously with almost no extra cost. Furthermore, its value can be used as a criterion for model selection. We will present in the next section some restoration results using our method.

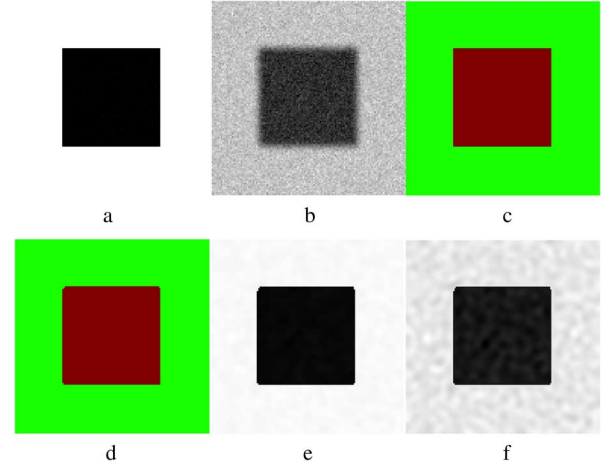


Fig. 3. Restoration results from MIG model: (a) original image, (b) distorted image, (c) original segmentation, (d) MIG segmentation, (e) VB MIG reconstruction, and (f) VB MGM reconstruction

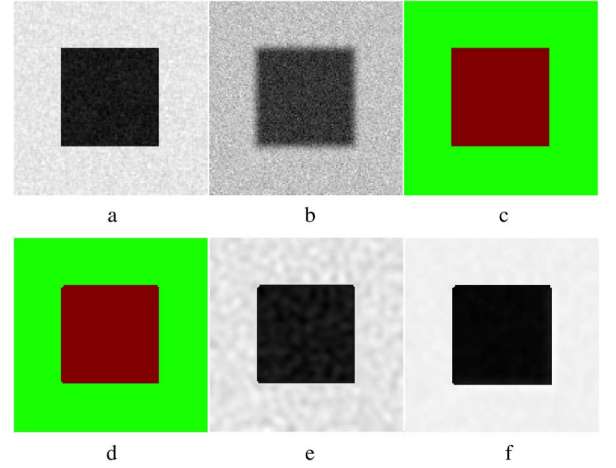


Fig. 4. Restoration results from MGM model: (a) original image, (b) distorted image, (c) original segmentation, (d) MGM segmentation, (e) VB MIG restoration, and (f) VB MGM restoration.

V. NUMERICAL EXPERIMENT RESULTS AND DISCUSSION

In this section, we show several restoration results using our method. We start first by defining the values of the hyper-hyperparameter that were used during the different experiments. Then, we apply the proposed methods on a synthesized restoration problem for images generated from our model. Afterwards, the method is applied on real images. Finally, we compare the performance of our method to some other ones and especially to a restoration method based upon the same prior model but with MCMC estimator.

We choose the value of hyper-hyperparameters in a way that our priors stay as noninformative as possible. However, for the Potts parameter we fixed the value that worked the best for us.

A. Model Generated Image Restoration

We start the test of our method by applying it on two simple images generated by our prior models (MIG and MGM). Then, a box triangle convolution kernel is applied and white Gaussian noise is added. The chosen values are given in Table II.

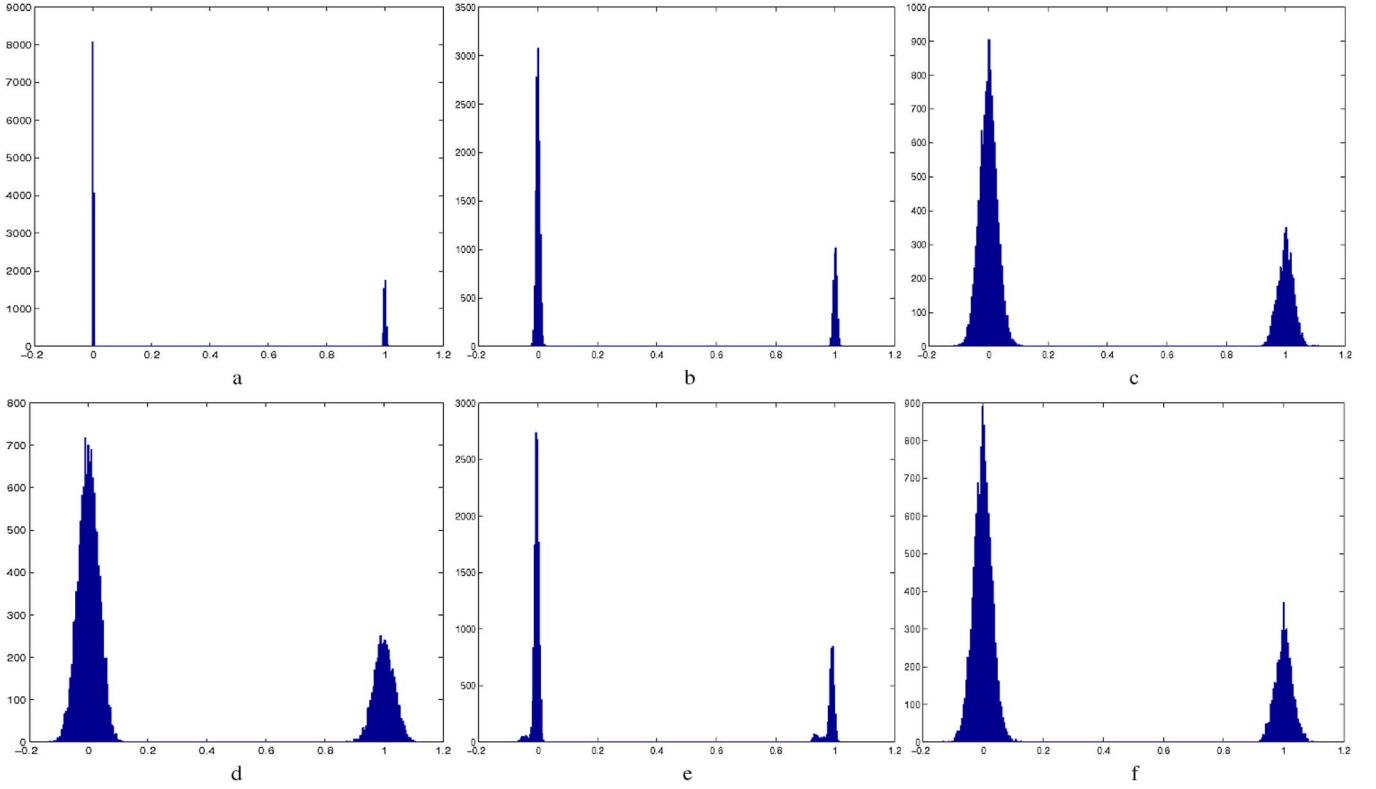


Fig. 5. Comparison between different histograms of the test images: (a) MIG, (b) VB MIG restoration for MIG image, (c) VB MIG restoration for MGM, (d) MGM, (e) VB MGM restoration for MIG image, and (f) VB MGM restoration for MGM image.

TABLE III
MIG IMAGE RESULTS SUMMARY

PSNR	Z error (%)	\tilde{m}	$\tilde{v} \times 10^{-6}$	$\tilde{\theta}_\epsilon$
31.2dB	$8 \times 10^{-2}\%$	(0.005,0.99)	(6,10)	100.5

TABLE IV
MGM IMAGE RESULTS SUMMARY

PSNR	Z error (%)	\tilde{m}	$\tilde{v} \times 10^{-3}$	$\tilde{\theta}_\epsilon$
27dB	$3 \times 10^{-2}\%$	(-0.001,1.003)	(30,2.7)	101.5

We can see from Fig. 3 that our method was able to restore the image with a small error (results details are available in Table III). However, we can see that the quality of construction of VB MIG is better than VB MGM, as expected, since in the MIG, pixels in the same class are modeled as Gaussian, while in the MGM the Gaussian property is imposed on the derivative (Markovian property). Similar results are found in the case of the MGM model generated image (see Table IV), the VB MGM method has a better restoration performance than the VB MIG method since it is more adaptive.

We can see this property more clearly by comparing the histogram of each of the images. From Fig. 5, the histograms of the MIG and the VB MIG restoration are very similar. The same observation can be made for the MGM and the VB MGM restored images.

TABLE V
TEXT RESTORATION EXPERIMENT CONDITIONS

Size	K	m	v	Filter Size	θ_ϵ
128×128	2	(0,1)	$(10^{-4}, 10^{-4})$	15×15	100

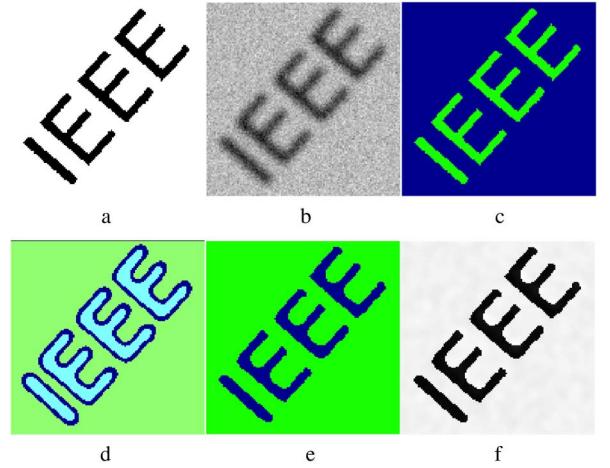


Fig. 6. Text restoration results: (a) original image, (b) distorted image, (c) original segmentation, (d) initial segmentation, (e) VB MIG segmentation, and (f) VB MIG restoration.

B. Testing Against “Real” Images

Herein, we show that our algorithm does not only work for images generated from the prior model but it works also for images resulting from several real applications. We start with a text restoration problem (see Table V). We apply the VB

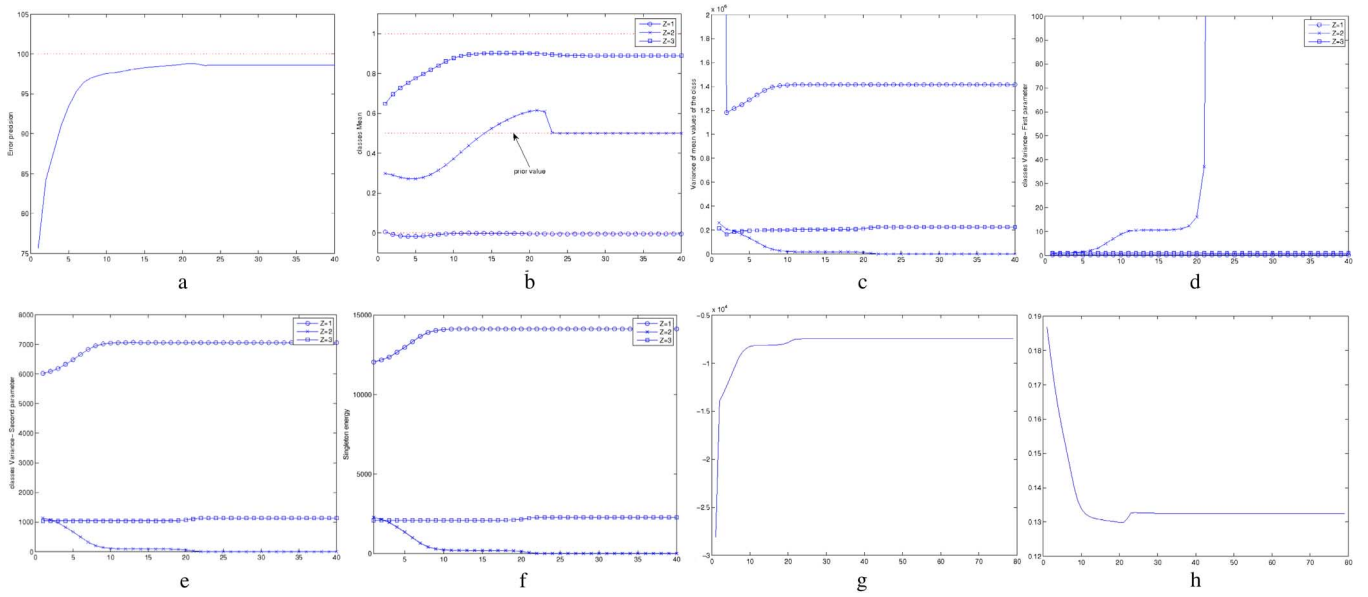


Fig. 7. Text restoration hyperparameters evolution vs iteration: (a) error precision $\bar{\theta}_e$, (b) classes mean \bar{m}_z , $z = 1, 2, 3$ (c), precision of class mean $\bar{\sigma}_z^{-1}$, $z = 1, 2, 3$, (d) class variance parameter 1 b , (e) class variance parameter 2 \bar{c} , (f) Singleton energy parameter $\bar{\kappa}_z$, $z = 1, 2, 3$, (g) Negative free energy, and (h) RMS of the error.

MIG restoration method but we show how it works with higher number of classes as prior information so we set the number of classes to three. As we can see from Fig. 6, the results contains only two classes (the background and the text). Although no direct estimation of optimal number of classes is implemented in the method, it is able to eliminate the extra class through the segmentation process, where pixels are classified with the dominating classes, while the eliminated class parameters are set to their prior values. Moreover, we are interested in the evolution of hyperparameters during the iterations (Fig. 7). We notice that almost all the variables reach their final value in 10 iterations. However, convergence is not achieved before iteration 25, this corresponds to the elimination of the extra class ($Z = 2$). All its hyperparameters take their prior values, and the negative free energy makes a step change toward its final value. In fact, this is very interesting since the log-evidence of the model can be approximated by the negative free energy after convergence. A higher value for the negative energy means a better fit of the model, which is the case with two classes instead of three. Nevertheless, the estimation of number of classes seems indispensable for other cases. Running a number of restorations with different values and comparing the value of the negative energy can achieve a first remedy.

Moreover, we have studied the performance of our method with images where our prior models do not correspond exactly (Figs. 8 and 9). Hopefully, our method still gives good results, though several flaws can be remarked. For example in the brain image, the grey material is more constant than the original image, because of the under estimation of the class variance. For Goofy image the background has over estimated variance.

To test the limits of our prior model, we have tested our method with a “classical” image of the image processing literature (the Cameraman, Fig. 10). As we can see, the method was able to restore the body of the camera man finely, notably his eye which disappeared in the distorted version. However, the

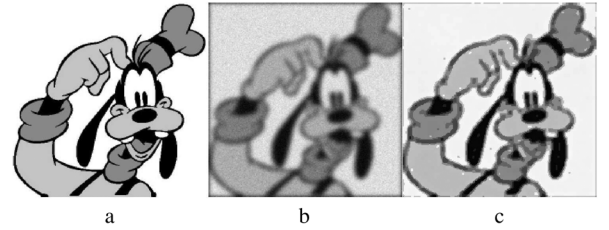


Fig. 8. Goofy restoration: (a) original image, (b) distorted image $\mathcal{L}_1 = 12.5\%$, and (c) MIG restoration $\mathcal{L}_1 = 7.8\%$.

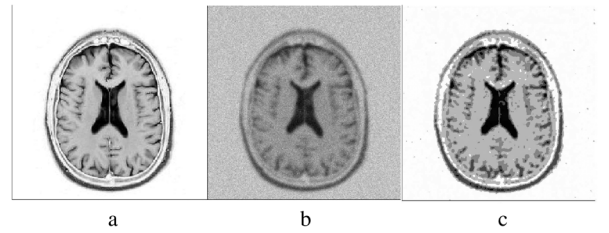


Fig. 9. Brain MRI restoration: (a) original image, (b) distorted image, and (c) VB MIG restoration.

major drawback is the restoration of textured areas. Instead of the continuously gradient sky the MIG output split it into two almost constant classes, the same thing happened for the grass. This is normal because of the homogeneous class prior. For the MIG model, these problems were less pronounced. However, the Gaussian property, which is acceptable for the sky, is not valid for the texture of the grass.

C. Comparison Against Other Restoration Methods

We present in the following a comparison between other restoration methods and the proposed one. The test is based upon two aspects: the quality of the restored image, and the computational time compared to an MCMC based algorithm with the same prior model. For the quality of restoration we

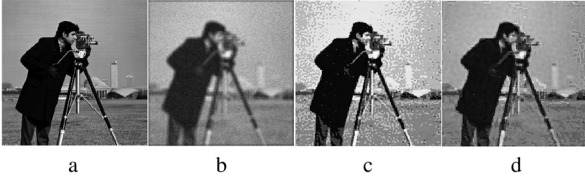


Fig. 10. Cameraman restoration: (a) original image, (b) distorted image, (c) VB MIG restoration, and (d) VB MGM restoration.

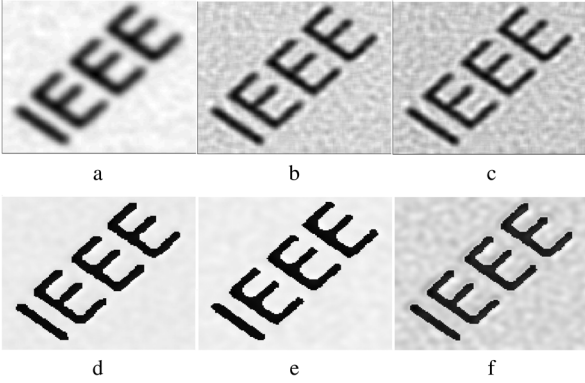


Fig. 11. Comparison between different restoration methods: (a) matched filter (MF), (b) Wiener filtering (WF), (c) least square (LS), (d) MCMC MIG, (e) VB MIG, and (f) VB MGM.

use \mathcal{L}_1 distance between the original image and the restored one (Table VI). The methods are: matched filter (MF), Wiener filter (WF), least square (LS), MCMC for a MIG prior (MCMC), and finally our two methods VB MIG (MIG), and VB MGM (MGM). We can see that our algorithm has good restoration performance in comparison to these methods.

For the computation time, the method is compared to a MCMC based estimator using the same prior. The tests are performed on a Intel Dual Core 2.66 GHz processor based machine with both algorithm coded in Matlab. The time was $T_{MIG} = 2$ s against $T_{MCMC} = 10$ s. Moreover, for higher dimensions MCMC like algorithms need more storage space for the samples, for example $|\mathcal{R}| = 2048 \times 2048$ images with $N_S = 1000$ samples MCMC will need storage size of $2 \times N_S \times |\mathcal{R}| \approx 8 \times 10^9$ pixels. While Variational Bayes based ones require the storage of the shaping parameters for the posterior laws in the current and previous iteration.

VI. CONCLUSION

We considered the problem of joint restoration and segmentation of images degraded by a known PSF and by Gaussian noise. To perform joint restoration and segmentation we proposed a Gauss–Markov–Potts prior model. More precisely, two priors, independent Gaussian and Gauss–Markov models, were studied with the Potts prior on the hidden field. The expression of the joint posterior law of all the unknowns (image, hidden field, hyperparameters) is complex and it is difficult to compute

¹ \mathcal{L}_1 are more adapted for piecewise homogeneous images, since difference image fits better in a double exponential distribution.

TABLE VI
NORMALIZED \mathcal{L}_1 DISTANCE FOR DIFFERENT METHODS. THE METHODS ARE: MATCHED FILTER (MF), WIENNER FILTER (WF), LEAST SQUARE (LS), MCMC FOR A MIG PRIOR (MCMC), AND FINALLY OUR TWO METHODS VB MIG (MIG), AND VB MGM (MGM)

MF	WF	LS	MCMC	MIG	MGM
0.10	0.084	0.085	0.040	0.029	0.051

MAP or PM estimators. Therefore, we proposed a Variational Bayes approximation method. This method was applied to several restoration problems, where it gave promising results.

Still, a number of the aspects regarding this method have to be studied, including the convergence conditions, the quality of estimation of classes and error variances, choice of separation and the estimation of the Potts parameter.

APPENDIX A PROBABILITY DISTRIBUTIONS

We recall herein the definition of the main probability distributions used in this article to avoid any ambiguity.

A. Gaussian

Let f be a random variable with Gaussian distribution with mean m and variance v . Then its distribution is given as

$$f \sim \mathcal{N}(m, v)$$

$$p(f) = \frac{1}{\sqrt{2\pi v}} \exp \left[-\frac{(f - m)^2}{2v} \right]. \quad (32)$$

B. Gamma and Inverse Gamma

Let θ be a random variable with a gamma distribution with scale parameter a , and shape parameter b . Then we have

$$\theta \sim \mathcal{G}(a, b)$$

$$p(\theta) = \frac{\theta^{b-1}}{\Gamma(b)a^b} \exp \left[-\frac{\theta}{a} \right] \quad (33)$$

with

$$\langle \theta \rangle = ab$$

$$\langle (\theta - ab)^2 \rangle = ab^2.$$

In similar way, we define inverse gamma probability distribution as follows:

$$\theta \sim \mathcal{IG}(a, b)$$

$$p(\theta) = \frac{a^b \theta^{-b-1}}{\Gamma(b)} \exp \left[-\frac{a}{\theta} \right] \quad (34)$$

with

$$\langle \theta \rangle = \frac{a}{b-1}$$

$$\left\langle \left(\theta - \frac{a}{b-1} \right)^2 \right\rangle = \frac{a^2}{(b-1)^2(b-2)}.$$

C. Multivariate Normal Distribution

Let the vector $\mathbf{f} = \{f_1, f_2, \dots, f_N\}$ follow a multivariate normal distribution with expected vector $\boldsymbol{\mu}$ and covariance matrix $\boldsymbol{\Sigma} > 0$. Then its probability density is given by

$$\mathbf{f} \sim \mathcal{N}(\boldsymbol{\mu}, \boldsymbol{\Sigma})$$

$$p(\mathbf{f}) = \frac{1}{\sqrt{(2\pi)^N |\boldsymbol{\Sigma}|}} \exp \left[-\frac{1}{2} (\mathbf{f} - \boldsymbol{\mu})^T \boldsymbol{\Sigma}^{-1} (\mathbf{f} - \boldsymbol{\mu}) \right]. \quad (35)$$

If a random $p \times p$ matrix $\boldsymbol{\Sigma}$ follow a Wishart distribution with $n \geq p$ degrees of freedom and a precision matrix $\mathbf{S} > 0$, its probability density is given by

$$\boldsymbol{\Sigma} \sim \mathcal{W}(\mathbf{S}, n, p)$$

$$p(\boldsymbol{\Sigma}) = w(n, p) |\mathbf{S}^{-1} \boldsymbol{\Sigma}|^{\frac{n}{2}} \exp \left[-\frac{\text{Trace}(\mathbf{S}^{-1} \boldsymbol{\Sigma})}{2} \right] \quad (36)$$

With

$$w(n, p) = \pi^{\frac{p(p-1)}{4}} 2^{\frac{np}{2}} \prod_{j=1}^p \Gamma \left(\frac{n-p+1}{2} \right) \quad (37)$$

and

$$\langle \boldsymbol{\Sigma} \rangle = \mathbf{S}$$

$$\langle (\boldsymbol{\Sigma} - \mathbf{S})(\boldsymbol{\Sigma} - \mathbf{S})^T \rangle = \mathbf{V}, \quad \text{with} \quad v_{ij} = ns_{ij}^2 (s_{ii} - s_{jj}).$$

D. Dirichlet

Let the vector $\boldsymbol{\zeta} = \{\zeta_1, \zeta_2, \dots, \zeta_K\}$ follow a Dirichlet distribution with $\boldsymbol{\kappa} = \{\kappa_1, \kappa_2, \dots, \kappa_K\}$ shaping parameters. Then we have

$$\boldsymbol{\zeta} \sim \mathcal{D}(\boldsymbol{\kappa})$$

$$p(\boldsymbol{\zeta}) = \Gamma \left(\sum_{k'=1}^K \kappa_{k'} \right) \prod_{k=1}^K \frac{\zeta_k^{\kappa_k - 1}}{\Gamma(\kappa_k)} \quad (38)$$

with

$$\langle \zeta_k \rangle = \frac{\kappa_k}{\sum_{k'=1}^K \kappa_{k'}}$$

$$\langle (\zeta_k - \langle \zeta_k \rangle)^2 \rangle = \frac{\kappa_k \left(\sum_{k'=1}^K \kappa_{k'} - \kappa_k \right)}{\left(\sum_{k'=1}^K \kappa_{k'} \right)^2 \left(\sum_{k'=1}^K \kappa_{k'} + 1 \right)}.$$

APPENDIX B

DERIVATION OF VARIATIONAL BAYES POSTERIOES

We present herein the derivation of Variational Bayes posterior of our problem. For the sake of simplicity, we will omit the iteration number t .

A. Image Conditional Posterior ($q(\mathbf{f}|\mathbf{z})$)

From (24) we can write

$$\ln(q(\mathbf{f}(\mathbf{r})|z(\mathbf{r})))$$

$$\propto \langle \ln(p(\mathbf{g}, \mathbf{f}, \mathbf{z}, \boldsymbol{\theta})) \rangle_{q-\mathbf{f}_r}$$

$$\propto \langle \ln(p(\mathbf{g}|\mathbf{f}, \theta_\epsilon)) \rangle_{q-\mathbf{f}_r} + \langle \ln(p(\mathbf{f}|\mathbf{z}, \mathbf{m}, \mathbf{v})) \rangle_{q-\mathbf{f}_r} \quad (39a)$$

$$\langle \ln(p(\mathbf{g}|\mathbf{f}, \theta_\epsilon)) \rangle_{q-\mathbf{f}_r}$$

$$\propto \bar{\theta}_\epsilon \sum_{\mathbf{s}} H^2(\mathbf{s}, \mathbf{r}) f^2(\mathbf{r}) - 2\bar{\theta}_\epsilon \sum_{\mathbf{s}} H(\mathbf{s}, \mathbf{r})$$

$$\times (g(\mathbf{s}) - \tilde{g}^{-\mathbf{r}}(\mathbf{s})) f(\mathbf{r}) \quad (39b)$$

$$\langle \ln(p(\mathbf{f}|\mathbf{z}, \mathbf{m}, \mathbf{v})) \rangle_{q-\mathbf{f}_r} \propto \frac{f^2(\mathbf{r}) - 2\tilde{\mu}_k^*(\mathbf{r})f(\mathbf{r})}{\bar{v}_k} \quad (39c)$$

$$\Rightarrow \ln(q(\mathbf{f}(\mathbf{r})|z(\mathbf{r}))) \propto \left(\frac{1}{\bar{v}_k} + \bar{\theta}_\epsilon \sum_{\mathbf{s}} H^2(\mathbf{s}, \mathbf{r}) \right) f^2(\mathbf{r})$$

$$- 2 \left(\frac{\tilde{\mu}_k^*(\mathbf{r})}{\bar{v}_k} \bar{\theta}_\epsilon \sum_{\mathbf{s}} H(\mathbf{s}, \mathbf{r}) (g(\mathbf{s}) - \tilde{g}^{-\mathbf{r}}(\mathbf{s})) \right)$$

$$\times f(\mathbf{r}) \quad (40a)$$

$$\Rightarrow \tilde{v}_k(\mathbf{r}) = \left[\frac{1}{\bar{v}_k} + \bar{\theta}_\epsilon \sum_{\mathbf{s}} H^2(\mathbf{s}, \mathbf{r}) \right]^{-1} \quad (40b)$$

$$\tilde{\mu}_k(\mathbf{r}) = \tilde{v}_k(\mathbf{r})$$

$$\times \left[\frac{\tilde{\mu}_k^*(\mathbf{r})}{\bar{v}_k} + \bar{\theta}_\epsilon \sum_{\mathbf{s}} H(\mathbf{s}, \mathbf{r}) (g(\mathbf{s}) - \tilde{g}^{-\mathbf{r}}(\mathbf{s})) \right] \quad (40c)$$

$$\text{With} \quad \tilde{g}^{-\mathbf{r}}(\mathbf{s}) = \sum_{\mathbf{r}' \neq \mathbf{r}} H(\mathbf{s}, \mathbf{r}') \tilde{f}(\mathbf{r}') \quad (40d)$$

$$\tilde{\mu}_k^*(\mathbf{r}) = \frac{1 - \tilde{C}_k(\mathbf{r})}{|\mathcal{V}(\mathbf{r})|} \sum_{\mathbf{r}' \in \mathcal{V}(\mathbf{r})} \tilde{f}(\mathbf{r}') + \tilde{C}_k(\mathbf{r}) \tilde{m}_k. \quad (40e)$$

By adding the missing term $f(\mathbf{r})$ in ((40d)), we get the gradient like expression of the posterior mean $\tilde{\mu}_k$

$$\tilde{\mu}_k(\mathbf{r}) = \tilde{v}_k(\mathbf{r}) \left[\frac{\tilde{\mu}_k^*(\mathbf{r})}{\bar{v}_k} + \bar{\theta}_\epsilon \sum_{\mathbf{s}} H(\mathbf{s}, \mathbf{r}) (g(\mathbf{s}) - \tilde{g}(\mathbf{s}) + H(\mathbf{s}, \mathbf{r}) \tilde{f}(\mathbf{r})) \right]$$

$$= \tilde{f}(\mathbf{r}) + \tilde{v}_k(\mathbf{r}) \left[\frac{\tilde{\mu}_k^* - \tilde{f}(\mathbf{r})}{\bar{v}_k} + \bar{\theta}_\epsilon \sum_{\mathbf{s}} H(\mathbf{s}, \mathbf{r}) (g(\mathbf{s}) - \tilde{g}(\mathbf{s})) \right].$$

B. Hidden Field Posterior ($q(\mathbf{z})$)

$$\ln(q(z(\mathbf{r}) = k))$$

$$\propto \langle \ln(p(\mathbf{g}, \mathbf{f}, \mathbf{z}, \boldsymbol{\theta})) \rangle_{q-\mathbf{z}_r}$$

$$\propto \langle \ln(p(\mathbf{g}|\mathbf{f}, \theta_\epsilon) p(\mathbf{f}|\mathbf{z}, \mathbf{m}, \mathbf{v})) \rangle_{q-\mathbf{z}_r}$$

$$+ \langle \ln(p(z(\mathbf{r}) = k|\boldsymbol{\kappa}, \gamma)) \rangle_{q-\mathbf{z}_r} \quad (41a)$$

$$\langle \ln(p(z(\mathbf{r})|\boldsymbol{\kappa}, \gamma)) \rangle_{q-\mathbf{z}_r}$$

$$\propto \langle \ln(\kappa_k) \rangle_{q(\boldsymbol{\kappa})}$$

$$+ \frac{\gamma}{2} \left\langle \sum_{\mathbf{r}' \in \mathcal{V}_r} \delta(z(\mathbf{r}') - k) \right\rangle_{\prod_{\mathbf{r}' \neq \mathbf{r}} q(z(\mathbf{r}'))}$$

$$\propto \Psi(\kappa_k) - \Psi \left(\sum_l \kappa_l \right) + \frac{\gamma}{2} \sum_{\mathbf{r}' \in \mathcal{V}_r} \tilde{\zeta}_k(\mathbf{r}') \quad (41b)$$

$$\langle \ln(p(\mathbf{g}|\mathbf{f}, \theta_\epsilon) p(\mathbf{f}|\mathbf{z}, \mathbf{m}, \mathbf{v})) \rangle_{q-\mathbf{z}_r}$$

$$\propto \frac{-\langle v_k^{-1} \mu_k^2(r) \rangle_{q-\mathbf{z}_r}}{2}$$

$$- \frac{1}{2} \left\langle \left(v_k^{-1} + \sum_{\mathbf{s}} H(\mathbf{s}, \mathbf{r}) \right) f^2(\mathbf{r}) \right\rangle_{q-\mathbf{z}_r}$$

$$\begin{aligned}
& + \langle v_k^{-1} \mu_k(\mathbf{r}) f(\mathbf{r}) \rangle_{q_{-z_r}} \\
& + \left\langle \left(\sum_{\mathbf{s}} H(\mathbf{s}, \mathbf{r}) \left[g(\mathbf{s}) - \sum_{\mathbf{r}' \neq \mathbf{r}} H(\mathbf{s}, \mathbf{r}') f(\mathbf{r}') \right] \right) \right. \\
& \quad \left. \times f(\mathbf{r}) \right\rangle_{q_{-z_r}} + \frac{1}{2} \langle \ln(v_k) \rangle_{q(v_k)}. \quad (42a)
\end{aligned}$$

By completing the square in the first term of (42a) and calculating the expectation with respect to all the posterior law except $q^{t-1}(f(\mathbf{r})|z(\mathbf{r}))$, we obtain the posterior $q^t(f(\mathbf{r})|z(\mathbf{r}))$ with other normalizing terms

$$\begin{aligned}
& \langle \ln(p(\mathbf{g}|\mathbf{f}, \theta_\epsilon) p(\mathbf{f}|\mathbf{z}, \mathbf{m}, \mathbf{v})) \rangle_{q_{-z_r}} \\
& \propto \frac{1}{2} \left(\Psi(\tilde{a}_k) + \ln(\tilde{b}_k) \right) \\
& \quad \times \frac{-1}{2} \langle \ln(q^t(f(\mathbf{r})|z(\mathbf{r}))) \rangle_{q^{t-1}(f(\mathbf{r})|z(\mathbf{r}))} \\
& \quad + \frac{1}{2} \left(\frac{(\tilde{\mu}_k^t(\mathbf{r}))^2}{\tilde{v}_k^t(\mathbf{r})} \right) - \frac{\langle \mu_k^2(\mathbf{r}) \rangle}{2\tilde{v}_k^{t-1}}. \quad (43a)
\end{aligned}$$

By arranging the previous terms, we get the three terms composing $q(z(\mathbf{r}))$ given in (28), with

$$\begin{aligned}
\langle \mu_k^2(\mathbf{r}) \rangle & = \frac{1 - \tilde{C}_k^{t-1}(\mathbf{r})}{|\mathcal{V}(\mathbf{r})|} \sum_{\mathbf{r}' \in \mathcal{V}(\mathbf{r})} \left[(\tilde{\mu}_k^{t-1}(\mathbf{r}'))^2 + \tilde{v}_k^{t-1}(\mathbf{r}) \right] \\
& \quad + \tilde{C}_k^{t-1}(\mathbf{r}) \left[(\tilde{m}_k^{t-1})^2 + \tilde{\sigma}_k^{t-1} \right]. \quad (44a)
\end{aligned}$$

C. Model Error Posterior ($q(\theta_\epsilon)$)

$$\begin{aligned}
& \ln(q(\theta_\epsilon)) \\
& \propto \langle \ln(p(\mathbf{g}, \mathbf{f}, \mathbf{z}, \boldsymbol{\theta})) \rangle_{q_{-\theta_\epsilon}} \\
& \propto \langle \ln(p(\mathbf{g}|\mathbf{f}, \theta_\epsilon)) \rangle_{q_{-\theta_\epsilon}} \\
& \quad + \langle \ln(p(\theta_\epsilon|\alpha_0, \beta_0)) \rangle_{q_{-\theta_\epsilon}} \quad (45a)
\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
& \langle \ln(p(\mathbf{g}|\mathbf{f}, \boldsymbol{\theta})) \rangle_{q_{-\theta_\epsilon}} \\
& \propto \frac{|\mathcal{R}|}{2} \ln(\theta_\epsilon) \\
& \quad - \frac{\theta_\epsilon}{2} \sum_{\mathbf{s}} \left\langle \left(g(\mathbf{s}) - \sum_{\mathbf{r}} H(\mathbf{s}, \mathbf{r}) f(\mathbf{r}) \right)^2 \right\rangle_{q_{-\theta_\epsilon}} \quad (45b)
\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
& \langle \ln(p(\theta_\epsilon|\alpha_0, \beta_0)) \rangle_{q_{-\theta_\epsilon}} \\
& \propto (\beta_0 - 1) \ln(\theta_\epsilon) - \frac{\theta_\epsilon}{\alpha_0}. \quad (45c)
\end{aligned}$$

Summing the last two terms lead us to the expression given in (29a) and (29b), with

$$\begin{aligned}
& \left\langle \left(g(\mathbf{s}) - \sum_{\mathbf{r}} H(\mathbf{s}, \mathbf{r}) f(\mathbf{r}) \right)^2 \right\rangle_{q_{-\theta_\epsilon}} \\
& = g^2(\mathbf{s}) - 2g(\mathbf{s})\tilde{g}(\mathbf{s}) \\
& \quad + \sum_{\mathbf{r}} H^2(\mathbf{s}, \mathbf{r}) \left[\sum_k \tilde{\zeta}_k(\mathbf{r}) ((\tilde{\mu}_k(\mathbf{r}))^2 + \tilde{v}_k(\mathbf{r})) - \tilde{f}^2(\mathbf{r}) \right] \\
& \quad + (\tilde{g}(\mathbf{s}))^2. \quad (46)
\end{aligned}$$

D. Classes Means Posterior ($q(\mathbf{m})$)

$$\begin{aligned}
\ln(q(\mathbf{m})) & \propto \langle \ln(p(\mathbf{g}, \mathbf{f}, \mathbf{z}, \boldsymbol{\theta})) \rangle_{q_{-\mathbf{m}}} \\
& \propto \langle \ln(p(\mathbf{f}|\mathbf{z}, \mathbf{m}, \mathbf{v})) \rangle_{q_{-\mathbf{m}}} \\
& \quad + \langle \ln(p(\mathbf{m}|m_0, \sigma_0)) \rangle_{q_{-\mathbf{m}}} \quad (47a)
\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
\langle \ln(p(\mathbf{f}|\mathbf{z}, \mathbf{m}, \mathbf{v})) \rangle_{q_{-\mathbf{m}}} & \propto \sum_k \sum_{\mathbf{r}} \frac{\tilde{\zeta}_k(\mathbf{r}) \tilde{C}_k(\mathbf{r}) m_k^2}{\tilde{v}_k} \\
& \quad - \frac{2\tilde{\zeta}_k(\mathbf{r}) \tilde{C}_k(\mathbf{r}) \tilde{\mu}_k(\mathbf{r}) m_k}{\tilde{v}_k} \quad (47b)
\end{aligned}$$

$$\langle \ln(p(\mathbf{m}|m_0, \sigma_0)) \rangle_{q_{-\mathbf{m}}} \propto \sum_k \frac{m_k^2 - 2m_0 m_k}{\sigma_0}. \quad (47c)$$

Gathering these terms leads to the Gaussian expression given in ((29c), (29d)).

E. Classes Variance Posteriors ($q(\mathbf{v})$)

$$\begin{aligned}
& \ln(q(\mathbf{v})) \\
& \propto \langle \ln(p(\mathbf{g}, \mathbf{f}, \mathbf{z}, \boldsymbol{\theta})) \rangle_{q_{-\mathbf{v}}} \\
& \propto \langle \ln(p(\mathbf{f}|\mathbf{m}, \mathbf{v}, \mathbf{z})) \rangle_{q_{-\mathbf{v}}} \\
& \quad + \langle \ln(p(\mathbf{v}|a_0, b_0)) \rangle_{q_{-\mathbf{v}}} \quad (48a)
\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
& \langle \ln(p(\mathbf{f}|\mathbf{m}, \mathbf{v}, \mathbf{z})) \rangle_{q_{-\mathbf{v}}} \\
& \propto \sum_k \frac{\tilde{\zeta}_k(\mathbf{r})}{2} \ln(v_k) \\
& \quad - \frac{v_k}{2} \sum_{\mathbf{r}} \left\langle (f(\mathbf{r}) - \mu_k(\mathbf{r}))^2 \right\rangle_{q_{-\mathbf{v}}} \quad (48b)
\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
& \langle \ln(p(\mathbf{v}|a_0, b_0)) \rangle_{q_{-\mathbf{v}}} \\
& \propto \sum_k (b_0 - 1) \ln(v_k) - \frac{v_k}{a_0}. \quad (48c)
\end{aligned}$$

With a similar technique to the one used in the model error posterior $q(\theta_\epsilon)$, we get the posterior $q(\mathbf{v})$ with

$$\begin{aligned}
& \left\langle (f(\mathbf{r}) - \mu_k(\mathbf{r}))^2 \right\rangle_{q_{-\mathbf{v}}} \\
& = \tilde{\zeta}_k(\mathbf{r}) \left[(\tilde{\mu}_k(\mathbf{r}))^2 + \tilde{v}_k(\mathbf{r}) - 2\tilde{\mu}_k(\mathbf{r})\tilde{\mu}_k^*(\mathbf{r}) \right] \\
& \quad + \frac{1 - \tilde{C}_k(\mathbf{r})}{|\mathcal{V}(\mathbf{r})|} \sum_{\mathbf{r}' \in \mathcal{V}(\mathbf{r})} \left[(\tilde{\mu}_k(\mathbf{r}'))^2 + \tilde{v}_k(\mathbf{r}) \right] \\
& \quad + \tilde{C}_k(\mathbf{r}) [(\tilde{m}_k)^2 + \tilde{\sigma}_k]. \quad (49)
\end{aligned}$$

F. Singleton Energy Posteriors ($q(\boldsymbol{\kappa})$)

$$\begin{aligned}
\ln(q(\boldsymbol{\kappa})) & \propto \langle \ln(p(\mathbf{g}, \mathbf{f}, \mathbf{z}, \boldsymbol{\theta})) \rangle_{q_{-\boldsymbol{\kappa}}} \\
& \propto \langle \ln(p(\mathbf{z}|\boldsymbol{\kappa}, \gamma)) \rangle_{q_{-\boldsymbol{\kappa}}} \\
& \quad + \langle \ln(p(\boldsymbol{\kappa}|\kappa_0)) \rangle_{q_{-\boldsymbol{\kappa}}} \quad (50a)
\end{aligned}$$

$$\langle \ln(p(\mathbf{z}|\boldsymbol{\kappa}, \gamma)) \rangle_{q_{-\boldsymbol{\kappa}}} \propto \sum_k \sum_{\mathbf{r}} \tilde{\zeta}_k(\mathbf{r}) \ln(\kappa_k) \quad (50b)$$

$$\langle \ln(p(\boldsymbol{\kappa}|\kappa_0)) \rangle_{q_{-\boldsymbol{\kappa}}} \propto \sum_k (\kappa_0 - 1) \ln(\kappa_k). \quad (50c)$$

Consequently, we obtain the same expression for $q(\kappa)$ given in (29g).

ACKNOWLEDGMENT

The authors would like to thank S. Fekih-Salem for her careful reading and revision of the paper.

REFERENCES

- [1] A. N. Tikhonov, "Solution of incorrectly formulated problems and the regularization method," *Sov. Math.*, pp. 1035–1038, 1963.
- [2] C. Bouman and K. Sauer, "A generalized Gaussian image model for edge-preserving MAP estimation," *IEEE Trans. Image Process.*, vol. 2, no. 3, pp. 296–310, Jul. 1993.
- [3] P. J. Green, "Bayesian reconstructions from emission tomography data using a modified EM algorithm," *IEEE Trans. Med. Imag.*, vol. 9, no. 1, pp. 84–93, Mar. 1990.
- [4] S. Geman and D. E. McClure, "Bayesian image analysis: Application to single photon emission computed tomography," *Amer. Statist. Assoc.*, pp. 12–18, 1985.
- [5] G. Demoment, "Image reconstruction and restoration: Overview of common estimation structures and problems," *IEEE Trans. Acoust., Speech, Signal Process.*, vol. 37, no. 12, pp. 2024–2036, Dec. 1989.
- [6] A. K. Katsaggelos, "Digital image restoration," in *Proc. Statist. Comput. Sect.*, Berlin, Germany, 1991, vol. 6, Lecture Notes in Mathematics 1832, pp. 12–18.
- [7] A. K. Jain, *Fundamentals of Digital Image Processing*. Upper Saddle River, NJ: Prentice-Hall, 1989.
- [8] S. Geman and D. Geman, *Stochastic Relaxation, Gibbs Distributions and the Bayesian Restoration of Images*. San Mateo, CA: Morgan Kaufmann, 1987.
- [9] F. C. Jeng, J. W. Woods, and B. Morristown, "Compound Gauss–Markov random fields for image estimation," *IEEE Trans. Signal Process.*, vol. 39, no. 3, pp. 683–697, Mar. 1991.
- [10] M. Nikolova, J. Idier, and A. Mohammad-Djafari, "Inversion of large-support illposed linear operators using a piecewise," *IEEE Trans. Image Process.*, vol. 7, no. 4, pp. 571–585, Apr. 1998.
- [11] M. Nikolova, "Local strong homogeneity of a regularized estimator," *SIAM J. Appl. Math.*, vol. 61, no. 2, pp. 633–658, 2000.
- [12] M. Nikolova, "Thresholding implied by truncated quadratic regularization," *IEEE Trans. Signal Process.*, vol. 48, no. 12, pp. 3437–3450, Dec. 2000.
- [13] G. Wang, J. Zhang, and G. W. Pan, "Solution of inverse problems in image processing by wavelet expansion," *IEEE Trans. Image Process.*, vol. 4, no. 5, pp. 579–593, May 1995.
- [14] J. M. Bioucas-Dias, "Bayesian wavelet-based image deconvolution: A GEM algorithm exploiting a class of heavy-tailed priors," *IEEE Trans. Image Process.*, vol. 15, no. 4, pp. 937–951, Apr. 2006.
- [15] G. E. Hinton and D. van Camp, "Keeping the neural networks simple by minimizing the description length of the weights," in *Proc. 6th Annu. Conf. Computational Learning Theory*, New York, 1993, pp. 5–13, ACM.
- [16] D. J. C. MacKay, "Ensemble learning and evidence maximization," in *Proc. NIPS*, 1995.
- [17] M. I. Jordan, Z. Ghahramani, T. S. Jaakkola, and L. K. Saul, "An introduction to variational methods for graphical models," *Mach. Learn.*, vol. 37, no. 2, pp. 183–233, 1999.
- [18] T. S. Jaakkola and M. I. Jordan, "Bayesian parameter estimation via variational methods," *Statist. Comput.*, vol. 10, no. 1, pp. 25–37, 2000.
- [19] M. Oppor and D. Saad, Eds., *Advanced Mean Field Methods: Theory and Practice*. Cambridge, MA: MIT Press, 2001.
- [20] H. Attias, "Independent factor analysis," *Neural Computat.*, vol. 11, no. 4, pp. 803–851, 1999.
- [21] A. C. Likas and N. P. Galatsanos, "A variational approach for bayesian blind image deconvolution," *IEEE Trans. Signal Process.*, vol. 52, no. 8, pp. 2222–2233, Aug. 2004.
- [22] R. Molina, J. Mateos, and A. K. Katsaggelos, "Blind deconvolution using a variational approach to parameter, image, and blur estimation," *IEEE Trans. Image Process.*, vol. 15, no. 12, pp. 3715–3727, Dec. 2006.
- [23] S. D. Babacan, R. Molina, and A. K. Katsaggelos, "Parameter estimation in TV image restoration using variational distribution approximation," *IEEE Trans. Image Process.*, vol. 17, no. 3, p. 326, Mar. 2008.
- [24] G. Chantas, N. Galatsanos, A. Likas, and M. Saunders, "Variational bayesian image restoration based on a product of t-distributions image prior," *IEEE Trans. Image Process.*, vol. 17, no. 10, pp. 1795–1805, Oct. 2008.
- [25] S. D. Babacan, R. Molina, and A. K. Katsaggelos, "Variational bayesian blind deconvolution using a total variation prior," *IEEE Trans. Image Process.*, vol. 18, no. 1, pp. 12–26, Jan. 2009.
- [26] D. G. Tzikas, A. C. Likas, and N. P. Galatsanos, "Variational bayesian sparse Kernel-based blind image deconvolution with student's-t priors," *IEEE Trans. Image Process.*, vol. 18, no. 4, pp. 753–764, Apr. 2009.
- [27] H. Snoussi and A. Mohammad-Djafari, "Fast joint separation and segmentation of mixed images," *J. Electron. Imag.*, vol. 13, p. 349, 2004.
- [28] O. Feron, B. Duchene, and A. Mohammad-Djafari, "Microwave imaging of inhomogeneous objects made of a finite number of dielectric and conductive materials from experimental data," *Inv. Prob.*, vol. 21, no. 6, p. 95, 2005.
- [29] F. Humblot, B. Collin, and A. Mohammad-Djafari, "Evaluation and practical issues of subpixel image registration using phase correlation methods," in *Proc. Physics in Signal and Image Processing Conf.*, 2005, pp. 115–120.
- [30] A. Mohammad-Djafari, "2D and 3D super-resolution: A Bayesian approach," in *Proc. AIP Conf.*, 2007, vol. 949, p. 18.
- [31] W. R. Gilks, S. Richardson, and D. J. Spiegelhalter, *Markov Chain Monte Carlo in Practice*. London, U.K.: Chapman & Hall, 1996.
- [32] A. Mohammad-Djafari, "Super-resolution: A short review, a new method based on hidden markov modeling of hr image and future challenges," *Comput. J.*, 2008, 10.1093/comjnl/bxn005:126–141.
- [33] Z. Ghahramani and M. Jordan, "Factorial hidden Markov models," *Mach. Learn.*, no. 29, pp. 245–273, 1997.
- [34] W. Penny and S. Roberts, "Bayesian neural networks for classification: How useful is the evidence framework?," *Neural Netw.*, vol. 12, pp. 877–892, 1998.
- [35] S. Roberts, D. Husmeier, W. Penny, and I. Rezek, "Bayesian approaches to gaussian mixture modelling," *IEEE Trans. Pattern Anal. Mach. Intell.*, vol. 20, no. 11, pp. 1133–1142, Nov. 1998.
- [36] W. Penny and S. Roberts, "Dynamic models for nonstationary signal segmentation," *Comput. Biomed. Res.*, vol. 32, no. 6, pp. 483–502, 1999.
- [37] W. Penny and S. Roberts, "Bayesian multivariate autoregressive models with structured priors," *Proc. IEE Vis., Image Signal Process.*, vol. 149, no. 1, pp. 33–41, 2002.
- [38] S. Roberts and W. Penny, "Variational bayes for generalised autoregressive models," *IEEE Trans. Signal Process.*, vol. 50, no. 9, pp. 2245–2257, Sep. 2002.
- [39] W. Penny and K. Friston, "Mixtures of general linear models for functional neuroimaging," *IEEE Trans. Med. Imag.*, vol. 22, no. 4, pp. 504–514, Apr. 2003.
- [40] R. A. Choudrey and S. J. Roberts, "Variational mixture of bayesian independent component analysers," *Neural Computat.*, vol. 15, no. 1, 2003.
- [41] W. Penny, S. Kiebel, and K. Friston, "Variational bayesian inference for fmri time series," *NeuroImage*, vol. 19, no. 3, pp. 727–741, 2003.
- [42] N. Nasios and A. Bors, "A variational approach for bayesian blind image deconvolution," *IEEE Trans. Signal Process.*, vol. 52, no. 8, pp. 2222–2233, Aug. 2004.
- [43] N. Nasios and A. Bors, "Variational learning for gaussian mixture models," *IEEE Trans. Syst., Man Cybern. B, Cybern.*, vol. 36, no. 4, pp. 849–862, Aug. 2006.
- [44] K. Friston, J. Mattout, N. Trujillo-Barreto, J. Ashburner, and W. Penny, "Variational free energy and the laplace approximation," *Neuroimage* 2006, (2006.08.035), Available Online.
- [45] R. A. Choudrey, "Variational Methods for Bayesian Independent Component Analysis," Ph.D. dissertation, Univ. Oxford, Oxford, U.K., 2002.



Hacheme Ayasso (S'08) was born in Syria in 1980. He received the engineer's degree in electronic systems from the Higher Institute of Applied Science and Technology, (ISSAT), Damascus, Syria, in 2002, the M.S. degree in signal and image processing from the University of Paris-Sud 11, Orsay, France, in 2007, and is currently working toward the Ph.D. degree at Paris-Sud 11 University in the inverse problems group (GPI) and Departement of Electromagnetics (DRE), part of laboratory of signals and systems, (L2S), Gif-sur-Yvette, France.

He was a research assistant in the electronic measurements group in ISSAT from 2003 to 2006, where he worked on non-destructive testing techniques. His research interests include the application of Bayesian inference techniques for inverse problems, X-ray, and microwave tomographic reconstruction.



Ali Mohammad-Djafari (M'02) was born in Iran. He received the B.Sc. degree in electrical engineering from Polytechnique of Teheran in 1975, the diploma degree (M.Sc.) from Ecole Supérieure d'Electricité (SUPELEC), Gif sur Yvette, France in 1977, the "Docteur-Ingénieur" (Ph.D.) degree and the "Doctorat d'Etat" in Physics from the Université Paris Sud 11 (UPS), Orsay, France, in 1981 and 1987, respectively.

He was Associate Professor at UPS for two years (1981–1983). Since 1984, he has a permanent position at "Centre National de la Recherche Scientifique (CNRS)" and works at "Laboratoire des Signaux et Systèmes (L2S)" at "SUPELEC." From 1998 to 2002, he has been at the head of Signal and Image Processing division at this laboratory. In 1997–1998, he has been visiting Associate Professor at University of Notre Dame, South Bend, IN. Presently, he is "Directeur de Recherche" and his main scientific interests are in developing new probabilistic methods based on Bayesian inference, information theory and maximum entropy approaches for inverse problems in general, and more specifically for signal and image reconstruction and restoration. His recent research projects contain: blind sources separation (BSS) for multivariate signals (satellites images, hyperspectral images), data and image fusion, superresolution, x-ray computed tomography, microwave imaging and spatial-temporal positrons emission tomography (PET) data and image processing. The main application domains of his interests are computed tomography (x-rays, PET, SPECT, MRI, microwave, ultrasound, and Eddy current imaging) either for medical imaging or for non-destructive testing (NDT) in industry.

Références

- [AK84] A.H. Andersen and A.C. Kak. Simultaneous algebraic reconstruction technique (SART) : a superior implementation of the ART algorithm. *Ultrasonic Imaging*, 6(1) :81–94, January 1984.
- [Arr99] S. R Arridge. Optical tomography in medical imaging. *Inverse problems*, 15 :R93, 1999.
- [AvdBm02] A. Abubakar, P.M. van den Berg, and J.J. Mallorqui. Imaging of biomedical data using a multiplicative regularized contrast source inversion method. *IEEE Transactions on Microwave Theory and Techniques*, 50(7) :1761–1771, July 2002.
- [Avr03] M. Avriel. *Nonlinear Programming : Analysis and Methods*. Dover Publications, September 2003.
- [BBJ96] E. Bleszynski, M. Bleszynski, and T. Jaroszewicz. AIM : adaptive integral method for solving large-scale electromagnetic scattering and radiation problems. *Radio Science*, 31(5) :1225–1251, 1996.
- [BBM⁺00] J. Baruchel, J. Y. Buffiere, E. Maire, P. Merle, and G. Peix. *X-ray tomography in material science*. Hermes Science, Paris, 2000.
- [BBP03] A. Baussard, K. Belkebir, and D. Prémel. A Markovian regularization approach of the modified gradient method for solving a two-dimensional inverse scattering problem. *Journal of Electromagnetic Waves and Applications*, 17 :989–1008, July 2003.
- [BIGL07] P.-A. Barriere, J. Idier, Y. Goussard, and J.-J. Laurin. 3-term optimization criterion for faster inversion in microwave tomography. In *4th IEEE International Symposium on Biomedical Imaging : From Nano to Macro, (ISBI)*, pages 225–228, 2007.
- [Bla61] J. Van Bladel. Some remarks on Green’s dyadic for infinite space. *IRE Transactions on Antennas and Propagation*, 9(6) :563–566, 1961.
- [BMD08] N. Bali and A. Mohammad-Djafari. Bayesian approach with hidden markov modeling and mean field approximation for hyperspectral data analysis. *IEEE Transactions on Image Processing*, 17(2) :217 –225, February 2008.
- [BN88] M. Baribaud and M.K. Nguyen. Maximum entropy image reconstruction from microwave scattered field distribution. In *Microwave Conference, 1988. 18th European*, pages 891–896, 1988.
- [Bor33] M. Born. *Optik : Ein Lehrbuch der elektromagnetischen Lichttheorie*. Springer, 3. aufl. 2. nachdruck edition, January 1933.

-
- [Bro75] W. N. Brouw. *Methods in computational physics*, chapter Aperture synthesis, pages 131 – 175. Academic, New York, 1975.
- [BS03] K. Belkebir and A. Sentenac. High-resolution optical diffraction microscopy. *Journal of the Optical Society of America. A, Optics, Image Science, and Vision*, 20(7) :1223–1229, July 2003. PMID : 12868629.
- [BT88] W.B. Beydoun and A. Tarantola. First Born and Rytov approximations : modeling and inversion conditions in a canonical example. *The Journal of the Acoustical Society of America*, 83(3) :1045–1055, March 1988.
- [CCUI09] I. Catapano, L. Crocco, M. D’Urso, and T. Isernia. 3D microwave imaging via preliminary support reconstruction : testing on the Fresnel 2008 database. *Inverse Problems*, 25(2) :024002, 2009.
- [CH80] T. Chang and G. T. Herman. A scientific study of filter selection for a fan-beam convolution reconstruction algorithm. *SIAM Journal on Applied Mathematics*, 39(1) :83–105, August 1980.
- [Che95] W. C. Chew. *Waves and Fields in Inhomogeneous Media*. IEEE Computer Society Press, February 1995.
- [CHJ09] Y. Censor, G. T. Herman, and M. Jiang. A note on the behavior of the randomized Kaczmarz algorithm of Strohmer and Vershynin. *The Journal of Fourier Analysis and Applications*, 15(4) :431–436, August 2009. PMID : 20495623 PMCID : 2872793.
- [Cho02] R.A. Choudrey. *Variational methods for Bayesian independent component analysis*. PhD thesis, University of Oxford, 2002.
- [CJMS00] W. C. Chew, J.-M. Jin, E. Michielssen, and J. Song. *Fast and Efficient Algorithms in Computational Electromagnetics*. Artech House Publishers, July 2000.
- [CK98] D. L. Colton and R. Kress. *Inverse Acoustic and Electromagnetic Scattering Theory*. Springer, 1998.
- [CKC⁺07] F. Charrière, J. Kühn, T. Colomb, E. Cuche, P. Marquet, and C. Depeursinge. Sub-cellular quantitative optical diffraction tomography with digital holographic microscopy. In *Society of Photo-Optical Instrumentation Engineers (SPIE) Conference Series*, volume 6441, page 16, 2007.
- [Cle96] P. C. Clemmow. *The Plane Wave Spectrum Representation of Electromagnetic Fields*. Oxford University Press, USA, 2nd edition, November 1996.
- [CLH06] X. Chen, D. Liang, and K. Huang. Microwave imaging 3-D buried objects using parallel genetic algorithm combined with FDTD technique. *Journal of Electromagnetic Waves and Applications*, 20(13) :1761–1774, 2006.
- [CMD97] H. Carfantan and A. Mohammad-Djafari. An overview of nonlinear diffraction tomography within the Bayesian estimation framework. In G. Chavent and P. Sabatier, editors, *Inverse Problems of Wave Propagation and Diffraction*, volume 486 of *Lecture Notes in Physics*, pages 107–124. Springer Berlin / Heidelberg, 1997. 10.1007/BFb0105764.
- [CMPD04] S. Caorsi, A. Massa, M. Pastorino, and M. Donelli. Improved microwave imaging procedure for nondestructive evaluations of two-dimensional structures. *IEEE Transactions on Antennas and Propagation*, 52(6) :1386 – 1397, 2004.

-
- [CMST84] S. S. Chaudhary, R. K. Mishra, A. Swarup, and J. M. Thomas. Dielectric properties of normal & malignant human breast tissues at radiowave & microwave frequencies. *Indian Journal of Biochemistry & Biophysics*, 21(1) :76, 1984.
- [CW90] W.C. Chew and Y.M. Wang. Reconstruction of two-dimensional permittivity distribution using the distorted Born iterative method. *IEEE Transactions on Medical Imaging*, 9(2) :218–225, 1990.
- [DB95] A.H. Delaney and Y. Bresler. Efficient edge-preserving regularization for limited-angle tomography. In *International Conference on Image Processing*, volume 3, page 3176, Los Alamitos, CA, USA, 1995. IEEE Computer Society.
- [Dea83] S. R. Deans. *The Radon Transform and Some of its Applications*. Wiley New York, 1983.
- [Def94] M. Defrise. A cone-beam reconstruction algorithm using shift-variant filtering and cone-beam backprojection. *IEEE Transactions on Medical Imaging*, 13(1) :186 – 195, 1994.
- [Dev82] A.J. Devaney. A filtered backpropagation algorithm for diffraction tomography. *Ultrasonic Imaging*, 4(4) :336–350, October 1982.
- [Dev92] A.J. Devaney. Diffraction tomographic reconstruction from intensity data. *IEEE Transactions on Image Processing*, 1(2) :221–228, 1992.
- [ELHK09] C. Eyraud, A. Litman, A. Hérique, and W. Kofman. Microwave imaging from experimental data within a Bayesian framework with realistic random noise. *Inverse Problems*, 25(2) :024005, 2009.
- [Eyr06] Christelle Eyraud. *Caractérisation et optimisation, dans le domaine des hyperfréquences, des mesures de champs diffractés. Applications aux problèmes directs et inverses tridimensionnels*. PhD thesis, Université de Provence Aix-Marseille I, 2006.
- [FDK84] L. A. Feldkamp, L. C. Davis, and J. W. Kress. Practical cone-beam algorithm. *Journal of the Optical Society of America A*, 1(6) :612–619, June 1984.
- [FDM05] O. Féron, B. Duchêne, and A. Mohammad-Djafari. Microwave imaging of inhomogeneous objects made of a finite number of dielectric and conductive materials from experimental data. *Inverse Problems*, 21(6) :S95, 2005.
- [FDMD07] O. Féron, B. Duchêne, and A. Mohammad-Djafari. Microwave imaging of piecewise constant objects in a 2D-TE configuration. *International Journal of Applied Electromagnetics and Mechanics*, 26(6) :167–174, IOS Press 2007.
- [Fey72] R. P. Feynman. *Statistical mechanics : a set of lectures*. Frontiers in physics. W.A. Benjamin, 1972.
- [FOG10] O. Féron, F. Orieux, and J.-F. Giovannelli. Echantillonnage de champs gaussiens de grande dimension. In *42èmes Journées de Statistique*, Marseille, France France, 2010.
- [FSM09] S. Fekih Salem Mestiri. *Approche bayésienne pour la reconstruction 3D en microtomographie X*. PhD thesis, University Paris- SUD 11 (France), 2009.
-

-
- [FT03] A. Franchois and A. G. Tijhuis. A quasi-Newton reconstruction algorithm for a complex microwave imaging scanner environment. *Radio Science*, 38 :13, January 2003.
- [Fér06] O. Féron. *Champs de Markov cachés pour les problèmes inverses. Application à la fusion de données et à la reconstruction d'images en tomographie micro-onde*. PhD thesis, Université Paris-Sud 11, 2006.
- [GBH70] R. Gordon, R. Bender, and G. T. Herman. Algebraic reconstruction techniques (ART) for three-dimensional electron microscopy and x-ray photography. *Journal of Theoretical Biology*, 29(3) :471–481, December 1970.
- [GCE⁺08] J.-M. Geffrin, P. C. Chaumet, C. Eyraud, K. Belkebir, and P. Sabouroux. Electromagnetic three-dimensional reconstruction of targets from free space experimental data. *Applied Physics Letters*, 92(19) :194103–3, 2008.
- [GG84] S. Geman and D. Geman. Stochastic relaxation, Gibbs distributions, and the Bayesian restoration of images. *IEEE Transactions on Pattern Analysis and Machine Intelligence*, PAMI-6(6) :721–741, 1984.
- [Gib08] W. C. Gibson. *The Method of Moments in Electromagnetics*. CRC Press, 2008.
- [Gio10b] J.F. Giovannelli. Estimation of the Ising field parameter thanks to the exact partition function. In *Proceeding of the 16th IEEE International Conference on Image Processing, (ICIP)*, 2010.
- [GM98] A. Gelman and X.-l. Meng. Simulating normalizing constants : from importance sampling to bridge sampling to path sampling. *Statistical Science*, 13(2) :163–185, 1998.
- [GMDH08] N. Gac, S. Mancini, M. Desvignes, and D. Houzet. High speed 3D tomography on CPU, GPU and FPGA. *EURASIP Journal on Embedded systems*, Special issue : Design and Architectures for Signal Image Processing :article ID 930250, <http://www.hindawi.com/GetArticle.aspx?doi=10.1155/2008/930250>, 2008.
- [GR87] L. Greengard and V. Rokhlin. A fast algorithm for particle simulations. *Journal of Computational Physics*, 73(2) :325–348, 1987.
- [GS09] J.M. Geffrin and P. Sabouroux. Continuing with the Fresnel database : experimental setup and improvements in 3D scattering measurements. *Inverse Problems*, 25(2) :024001, 2009.
- [Har93] R. F. Harrington. *Field Computation by Moment Methods*. Wiley-IEEE Press, April 1993.
- [Has70] W. K. Hastings. Monte Carlo sampling methods using Markov chains and their applications. *Biometrika*, 57(1) :97–109, April 1970.
- [Hen09] T. Henriksson. *Contribution to quantitative microwave imaging techniques for biomedical applications*. PhD thesis, Université Paris-Sud 11 - Mälardalen University, 2009.
- [HGD77] M.J. Hagmann, O.P. Gandhi, and C.H. Durney. Upper bound on cell size for moment-method solutions. *IEEE Transactions on Microwave Theory and Techniques*, 25(10) :831–832, 1977.

-
- [HGS93] T. M. Habashy, R. W. Groom, and B. R. Spies. Beyond the Born and Rytov approximations : a nonlinear approach to electromagnetic scattering. *J. Geophys. Res.*, 98(B2) :1759–1775, 1993.
- [Hir97] H.P. Hiriyanaiiah. X-ray computed tomography for medical imaging. *IEEE Signal Processing Magazine*, 14(2) :42–59, 1997.
- [HS52] M. Hestenes and E. Stiefel. Methods of conjugate gradients for solving linear systems. *Journal of Research of the National Bureau of Standards*, 49(6) :409–436, December 1952.
- [HSG07] O. Haeberle, A. Sentenac, and H. Giovannini. *Modern Research and Educational Topics in Microscopy*, chapter An introduction to diffractive tomographic microscopy, pages 956–967. Mendez-Vilas,A., Diaz, J., Eds., Badajoz, Spain, 2007.
- [HSSW80] C. Hamaker, K.T. Smith, D.C. Solomon, and S.L. Wagner. The divergent beam x-ray transform. *Rocky Mountain Journal of Mathematics*, 10(1) :253–284, 1980.
- [HvC93] G. E. Hinton and D. van Camp. Keeping the neural networks simple by minimizing the description length of the weights. In *Proceedings of the sixth Annual Conference on Computational Learning Theory*, pages 5–13. ACM New York, NY, USA, 1993.
- [HvdBK98] K.F.I. Haak, P.M. van den Berg, and R.E. Kleinman. Contrast source inversion method using multi-frequency data. In *Antennas and Propagation Society International Symposium, 1998. IEEE*, volume 2, pages 710–713, 1998.
- [HW83] K. M. Hanson and G. W. Wecksung. Bayesian approach to limited-angle reconstruction in computed tomography. *Journal of the Optical Society of America*, 73(11) :1501–1509, November 1983.
- [Jal01] A. Jalobeanu. *Modèles, estimation bayésienne et algorithmes pour la déconvolution d’images satellitaires et aériennes*. PhD thesis, Nice Sophia Antipolis, 2001.
- [JGJS99] M. I. Jordan, Z. Ghahramani, T. S. Jaakkola, and L. K. Saul. An introduction to variational methods for graphical models. *Machine Learning*, 37(2) :183–233, 1999.
- [Jin02] J. Jin. *The Finite Element Method in Electromagnetics*. Wiley-IEEE Press, 2 edition, May 2002.
- [JJ00] T. S. Jaakkola and M. I. Jordan. Bayesian parameter estimation via variational methods. *Statistics and Computing*, 10(1) :25–37, 2000.
- [JNM91] J.I. Jackson, C.H. Meyer, D.G. Nishimura, and A. Macovski. Selection of a convolution function for Fourier inversion using gridding [computerised tomography application]. *IEEE Transactions on Medical Imaging*, 10(3) :473–478, 1991.
- [Jos82] P. M. Joseph. An improved algorithm for reprojecting rays through pixel images. *IEEE Transactions on Medical Imaging*, 1(3) :192–196, 1982.
- [JP90] N. Joachimowicz and C. Pichot. Comparison of three integral formulations for the 2-D TE scattering problem. *IEEE Transactions on Microwave Theory and Techniques*, 38(2) :178–185, 1990.
-

-
- [JPH91] N. Joachimowicz, C. Pichot, and J.P. Hugonin. Inverse scattering : an iterative numerical method for electromagnetic imaging. *IEEE Transactions on Antennas and Propagation*, 39(12) :1742–1753, 1991.
- [JZLJ94] W. T. Joines, Y. Zhang, C. Li, and R. L. Jirtle. The measured electrical properties of normal and malignant human tissues from 50 to 900 MHz. *Medical Physics*, 21 :547, 1994.
- [Kac37] S. Kaczmarz. Angen aherte aufl osung von systemen linearer gleichungen. *Bull. Int. Acad. Polon. Sci. A*, 355 :357, 1937.
- [KGV83] S. Kirkpatrick, C. D. Gelatt, and M. P. Vecchi. Optimization by simulated annealing. *Science*, 220(4598) :671–680, May 1983.
- [KRI10] B. Kherrab, T. Rodet, and J. Idier. Solving a problem of sources separation stemming from a linear combination : Applied to the 3D reconstruction of the solar atmosphere. In *ICASSP*, pages 1338 – 1341, 2010. DOI : 10.1109/ICASSP.2010.5495439.
- [KS88] A. C. Kak and M. Slaney. *Principles of Computerized Tomographic Imaging*. IEEE Service Center, Piscataway, NJ, 1988.
- [LAvdB09] M. Li, A. Abubakar, and P. M. van den Berg. Application of the multiplicative regularized contrast source inversion method on 3D experimental Fresnel data. *Inverse Problems*, 25(2) :024006, 2009.
- [LC74] D.E. Livesay and K. Chen. Electromagnetic fields induced inside arbitrarily shaped biological bodies. *IEEE Transactions on Microwave Theory and Techniques*, 22(12) :1273 – 1280, 1974.
- [LC84] K. Lange and R. Carson. EM reconstruction algorithms for emission and transmission tomography. *Journal of Computer Assisted Tomography*, 8(2) :306–316, April 1984. PMID : 6608535.
- [LCA07] T. Le, R. Chartrand, and T. J. Asaki. A variational approach to reconstructing images corrupted by Poisson noise. *Journal of Mathematical Imaging and Vision*, 27(3) :257–263, 2007.
- [LD91a] K. T. Ladas and A. J. Devaney. Generalized ART algorithm for diffraction tomography. *Inverse Problems*, 7 :109, 1991.
- [LD91b] D. Lesselier and B. Duchêne. Buried, 2-D penetrable objects illuminated by line-sources : FFT-based iterative computations of the anomalous field. In *Application of Conjugate Gradient Methods to Electromagnetics and Signal Analysis*, number 5 in PIER, pages 400—438. T. K. Sarkar, New York, 1991.
- [LG04] A. C. Likas and N. P. Galatsanos. A variational approach for Bayesian blind image deconvolution. *IEEE Transactions on Signal Processing*, 52(8) :2222–2233, 2004.
- [LH01] X. Li and S. C. Hagness. A confocal microwave imaging algorithm for breast cancer detection. *IEEE Microwave and Wireless Components Letters*, 11(3) :130 – 132, 2001.
- [LLS04] F. Li, Q. H. Liu, and L.-P. Song. Three-dimensional reconstruction of objects buried in layered media using Born and distorted Born iterative methods. *IEEE Geoscience and Remote Sensing Letters*, 1(2) :107–111, 2004.

-
- [Mac95] D. J. C. MacKay. Ensemble learning and evidence maximization. <http://citeseerx.ist.psu.edu/viewdoc/summary?doi=10.1.1.54.4083>, 1995.
- [Mac96] D. J. C. MacKay. Introduction to Monte-Carlo methods. In *Learning in Graphical Models*, pages 175–204, 1996.
- [Mas00] S. Mase. Marked Gibbs processes and asymptotic normality of maximum pseudo-likelihood estimators. *Mathematische Nachrichten*, 209(1) :151–169, 2000.
- [MB04] B. De Man and S. Basu. Distance-driven projection and backprojection in three dimensions. *Physics in Medicine and Biology*, 49(11) :2463–2475, 2004.
- [MD88] A. Mohammad-Djafari and G. Demoment. Maximum entropy image reconstruction in X-ray and diffraction tomography. *IEEE transactions on Medical Imaging*, 7(4) :345–354, 1988.
- [MD94] A. Mohammad-Djafari. Maximum d’entropie et problèmes inverses en imagerie. *Traitement du Signal*, 11 :87–116, 1994.
- [MDG⁺09] G. Maire, F. Drsek, J. Girard, H. Giovannini, A. Talneau, D. Konan, K. Belkebir, P. C. Chaumet, and A. Sentenac. Experimental demonstration of quantitative imaging beyond Abbe’s limit with optical diffraction tomography. *Physical Review Letters*, 102(21) :213905, May 2009. PMID : 19519110.
- [MF53] P. M. Morse and H. Feshbach. *Methods of Theoretical Physics, Part II*. McGraw-Hill Science/Engineering/Math, June 1953.
- [Mid99] D. Middleton. Non-Gaussian noise models in signal processing for telecommunications : new methods and results for class a and class b noise models. *IEEE Transactions on Information Theory*, 45(4) :1129–1149, 1999.
- [MPRB06] J. Møller, A. N. Pettitt, R. Reeves, and K. K. Berthelsen. An efficient Markov chain Monte-Carlo method for distributions with intractable normalising constants. *Biometrika*, 93(2) :451–458, June 2006.
- [MR06] A. Mohammad-Djafari and L. Robillard. Hierarchical Markovian models for 3D computed tomography in non destructive testing applications. In *Proc. EUSIPCO*, pages 111–115, 2006.
- [MRR⁺53] N. Metropolis, A. W. Rosenbluth, M. N. Rosenbluth, A. H. Teller, and E. Teller. Equation of state calculations by fast computing machines. *The Journal of Chemical Physics*, 21(6) :1087, 1953.
- [MSO⁺04] A. B. Milstein, J. J. Stott, S. Oh, D. A. Boas, R. P. Millane, C. A. Bouman, and K. J. Webb. Fluorescence optical diffusion tomography using multiple-frequency data. *Journal of the Optical Society of America A : Optics, Image Science and Vision*, 21 :1035–1049, 2004.
- [NM94] M. K. Nguyen and A. Mohammad-Djafari. Bayesian approach with the maximum entropy principle in image reconstruction from microwave scattered field data. *IEEE Transactions on Medical Imaging*, 13(2) :254–262, 1994.
- [NW01] F. Natterer and F. Wübbeling. *Mathematical Methods in Image Reconstruction*. SIAM : Society for Industrial and Applied Mathematics, 1st edition, December 2001.
-

-
- [OF97] J. M Ollinger and J. A Fessler. Positron-emission tomography. *IEEE Signal Processing Magazine*, 14(1) :43–55, 1997.
- [O’S85] J. D. O’Sullivan. A fast sinc function gridding algorithm for Fourier inversion in computer tomography. *IEEE Transactions on Medical Imaging*, 4(4) :200–207, 1985.
- [Pea95] K. Pearson. Contributions to the mathematical theory of evolution. *Proceedings of the Royal Society of London*, 59 :71–110, 1895. ArticleType : research-article / Full publication date : 1895 - 1896 / Copyright © 1895 The Royal Society.
- [PF03] V. Pascasio and G. Ferraiuolo. Statistical regularization in linearized microwave imaging through MRF-based MAP estimation : hyperparameter estimation and image computation. *IEEE Transactions on Image Processing*, 12(5) :572–582, 2003.
- [PGM96] F. Peyrin, L. Garnero, and I. Magnin. Introduction à l’imagerie tomographique 2D et 3D reposant sur la propagation en ligne droite. Cas de la tomographie par rayon X, par émission et par ultrasons. *Traitement du Signal*, 13(4) :381–413, 1996.
- [PK97] S. Portnoy and R. Koenker. The Gaussian hare and the Laplacian tortoise : computability of squared- error versus absolute-error estimators. *Statistical Science*, 12(4) :279–296, November 1997.
- [PPB99] R. Pierri, R. Persico, and R. Bernini. Information content of the Born field scattered by an embedded slab : multifrequency, multiview, and multifrequency-multiview cases. *Journal of the Optical Society of America A*, 16(10) :2392–2399, October 1999.
- [PRM97] A. F. Peterson, S. L. Ray, and R. Mittra. *Computational Methods for Electromagnetics*. Wiley-IEEE Press, December 1997.
- [Ric66] J. Richmond. TE-wave scattering by a dielectric cylinder of arbitrary cross-section shape. *IEEE Transactions on Antennas and Propagation*, 14(4) :460–464, 1966.
- [Ric09] J. A. Richards. *Remote Sensing with Imaging Radar*. Springer, 1 edition, October 2009.
- [RvdB00] R. F. Remis and P. M. van den Berg. On the equivalence of the Newton-Kantorovich and distorted Born methods. *Inverse Problems*, 16 :L1, 2000.
- [Sat01] M.a. Sato. Online model selection based on the variational Bayes. *Neural Computation*, 13(7) :1649–1681, July 2001.
- [SBH06] J. J. Scheins, F. Boschen, and H. Herzog. Analytical calculation of volumes-of-intersection for iterative, fully 3-D PET reconstruction. *IEEE Transactions on Medical Imaging*, 25(10) :1363–1369, October 2006. PMID : 17024839.
- [SBS98] S.S. Saquib, C.A. Bouman, and K. Sauer. ML parameter estimation for Markov random fields with applications to Bayesian tomography. *IEEE Transactions on Image Processing*, 7(7) :1029–1044, 1998.
- [Sch04] Sir A. Schuster. *An Introduction to the Theory of Optics*. E. Arnold, 1904.
- [SDLK96] L. Souriau, B. Duchêne, D. Lesselier, and R. E. Kleinman. Modified gradient approach to inverse scattering for binary objects in stratified media. *Inverse Problems*, 12(4) :463–481, 1996.

-
- [SK85] K. T. Smith and F. Keinert. Mathematical foundations of computed tomography. *Applied Optics*, 24(23) :3950–3957, December 1985.
- [Ski04] J. Skilling. Nested sampling. *AIP Conference Proceedings*, 735(1) :395–405, November 2004.
- [Ski06] J. Skilling. Nested sampling for general Bayesian computation. *Bayesian Analysis*, 1(4) :833–860, 2006.
- [SLJB07] J. Song, Q. H. Liu, G. A. Johnson, and C. T. Badea. Sparseness prior based iterative image reconstruction for retrospectively gated cardiac micro-CT. *Medical physics*, 34(11) :4476–4483, November 2007. PMID : 18072512 PMCID : 2366112.
- [SQ06] V. Smídl and A. Quinn. *The Variational Bayes Method in Signal Processing*. Springer Verlag, Berlin, 2006.
- [Tat61] V. I. Tatarski. *Wave Propagation in a Turbulent Medium*, chapter 7. McGraw Hill, 1961.
- [TH05] A. Taflove and S. C. Hagness. *Computational Electrodynamics : The Finite-Difference Time-Domain Method, Third Edition*. Artech House Publishers, 3 edition, June 2005.
- [Tik63] A.N. Tikhonov. Solution of incorrectly formulated problems and the regularization method. *Soviet mathematics - Doklady*, 4(4) :1035–1038, 1963.
- [Tit86] D. M. Titterton. *Statistical Analysis of Finite Mixture Distributions*. John Wiley & Sons, January 1986.
- [vdBK97] P. M. van den Berg and R. E. Kleinman. A contrast source inversion method. *Inverse Problems*, 13 :1607, 1997.
- [vdBvBA99] P. M. van den Berg, A. L. van Broekhoven, and A. Abubakar. Extended contrast source inversion. *Inverse Problems*, 15(5) :1325–1344, 1999.
- [WSH03] S. Weber, C. Schnorr, and J. Hornegger. A linear programming relaxation for binary tomography with smoothness priors. *Electronic Notes in Discrete Mathematics*, 12 :243–254, March 2003.
- [WT87] R.-S. Wu and M. N. Toksoz. Diffraction tomography and multisource holography applied to seismic imaging. *Geophysics*, 52(1) :11–25, January 1987.
- [XL02] X. M. Xu and Q. H. Liu. The BCGS-FFT method for electromagnetic scattering from inhomogeneous objects in a planarly layered medium. *Antennas and Wireless Propagation Letters*, 1 :77–80, 2002.
- [XM06] F. Xu and K. Mueller. A comparative study of popular interpolation and integration methods for use in computed tomography. In *3rd IEEE International Symposium on Biomedical Imaging : Nano to Macro*, pages 1252 –1255, September 2006.
- [Yee66] K. Yee. Numerical solution of initial boundary value problems involving Maxwell’s equations in isotropic media. *IEEE Transactions on Antennas and Propagation*, 14(3) :302–307, 1966.
- [YYL09] C. Yu, M. Yuan, and Q. H. Liu. Reconstruction of 3D objects from multi-frequency experimental data with a fast DBIM-BCGS method. *Inverse Problems*, 25(2) :024007, 2009.
-

-
- [ZF09] J. De Zaeytjld and A. Franchois. Three-dimensional quantitative microwave imaging from measured data with multiplicative smoothing and value picking regularization. *Inverse Problems*, 25(2) :024004, 2009.
- [ZFEG07] J. De Zaeytjld, A. Franchois, C. Eyraud, and J. Geffrin. Full-wave three-dimensional microwave imaging with a regularized Gauss-Newton method-theory and experiment. *IEEE Transactions on Antennas and Propagation*, 55(11) :3279, 2007.
- [ZGH94] W. Zhuang, S.S. Gopal, and T.J. Hebert. Numerical evaluation of methods for computing tomographic projections. *IEEE Transactions on Nuclear Science*, 41(4) :1660–1665, August 1994.